1970.

G. Gneuss

[illegible]

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der

[illegible] Fakultät

der

Johann - Wolfgang - Goethe - Universität

zu

Frankfurt am Main

vorgelegt von

[illegible]

aus

[illegible]

[illegible]

ÜBER KOLLEKTIVE EIGENSCHAFTEN VON ATOMKERNEN

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Johann - Wolfgang - Goethe - Universität

zu

Frankfurt am Main

Vorgelegt von

G o t t h a r d   G n e u ß

aus

Großharthau/Sachsen

Juni 1970

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Frankfurt am Main

Dekan:	Prof. Dr. G. Schneider
Leiter der Arbeit:	Prof. Dr. W. Greiner
Erstgutachter:	Prof. Dr. W. Greiner
Zweitgutachter:	Prof. Dr. P. Fulde

Tag der mündlichen Prüfung: 10.9.70

Inhalt

Abstract

A collective nuclear Hamiltonian is constructed which involves all important categories of nuclei, reaching from spherical or anharmonic vibrators to strongly deformed symmetric or asymmetric rotators. The dynamical problem is solved without approximations by diagonalizing the Hamiltonian in the basis of a 5-dimensional harmonic oscillator.

Einleitung

Mit dieser Arbeit möchten wir dazu beitragen, die Dynamik der gg-Kerne im niederenergetischen Bereich besser zu verstehen und genauer zu beschreiben als bisher. Wir gehen davon aus, daß die untersten Energie-Niveaus fast aller gg-Kerne durch koordinierte Bewegung vieler Nukleonen zustande kommen; denn sowohl die Strukturen der Niederenergie-Spektren, etwa Rotationsbanden, als auch die experimentell ermittelten großen Übergangswahrscheinlichkeiten deuten auf "kollektive Effekte" hin. Im Einklang mit dieser Erkenntnis lautet der Grundgedanke unseres Kernmodells: Statt eine Dynamik des Atomkerns mit dem ungeheuren Aufwand von $5 \cdot A$ Freiheitsgraden (Orts-, Spin- und Isospin-Koordinaten der Nukleonen) zu entwickeln, versuche man, das Problem durch Einführung einiger weniger kollektiver Variablen zu lösen.

Vom Ansatz her ist eine Dynamik, die die einzelnen Nukleonen berücksichtigt, eine "mikroskopische Theorie" also, ohne Zweifel befriedigender; doch in der Praxis waren solche Versuche bisher wenig erfolgreich. In den mikroskopischen Rechnungen strebt man an, die Unzulänglichkeit des reinen Schalenmodells zur Erklärung kollektiver Anregungen durch den Einbau von Restwechselwirkungen zwischen den Nukleonen zu beheben. Die numerischen Hindernisse zwingen dabei stets zu einschneidenden Näherungen. In Teilchen-Loch-Rechnungen beispielsweise schränkt man die Basis zur Diagonalisierung der Restwechselwirkung empfindlich ein, indem man zum einen nur wenige Schalenmodellzustände nahe der Fermikante zur Konstruktion von Teilchen-Loch-Funktionen heranzieht und dabei zum anderen nur Kombinationen von wenigen Teilchen und wenigen Löchern zuläßt. Daß gerade solcherlei Approximationen die Qualität der Beschreibung kollektiver Vorgänge mindert, ist einleuchtend. Hinzu kommt, daß Spuriositäten -hervorgerufen durch Verletzung von Invarianzen im Schalenmodell- die Ergebnisse mikroskopischer Rechnungen unsicher machen.

Selbst wenn sich die richtigen Ergebnisse allein aus der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung frei von Modellannahmen herleiten ließen, nützten doch diese Resultate unserem Verständnis kaum, weil wir sie wegen ihrer Unhandlichkeit und Abstraktheit nicht deuten könnten. Dagegen zeichnet sich unser Kollektivmodell auch durch seine Anschaulichkeit aus. Obwohl wir die gesamte Kerndynamik im Laborsystem untersuchen, gewinnen wir nämlich durch Transformation der potentiellen Energie in das Intrinsic-System des Kerns eine Fläche, die die Kernstruktur unmittelbar widerspiegelt. Diese "kollektive Potential-Fläche", der zentrale Begriff dieser Arbeit, verrät auf den ersten Blick die wesentlichen Kerneigenschaften, sie ermöglicht dadurch die physikalische Interpretation unserer Ergebnisse, und sie stellt darüber hinaus die Verbindung mit den mikroskopischen Theorien her.

Unser Modell, beschränkt auf die Quadrupol-Deformationen des Kerns, enthält alle wichtigen Kerntypen, angefangen von sphärischen Vibratoren bis hin zu stark deformierten achsialsymmetrischen oder auch asymmetrischen Rotatoren. Eigenwerte und Eigenfunktionen werden durch Diagonalisierung des Hamilton-Operators in der Basis des fünfdimensionalen harmonischen Oszillators berechnet. Dieses numerische Verfahren behandelt Rotationen und Vibrationen in einheitlicher Weise und garantiert, daß die Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen kollektiven Freiheitsgraden exakt berücksichtigt werden.

Sowohl gemeinsam mit mikroskopischen Theorien, die die Parameter unseres kollektiven Hamilton-Operators liefern [1] [2] , als auch losgelöst davon, durch Formungen an der kollektiven Potential-Fläche, werden wir versuchen, die Zusammenhänge in den kollektiven Spektren aufzuklären und die experimentellen Daten wiederzugeben.

Wir gliedern die Arbeit in drei Teile. Im Kapitel I werden die mathematischen Methoden dargelegt, auf die wir bei der quantenmechanischen Behandlung unseres Modells zurückgreifen. Kapitel II

handelt von der kollektiven Potential-Fläche, mit der wir den physikalischen Inhalt der quantentheoretischen Resultate erschließen. Dadurch, daß die mathematischen Hilfsmittel und auch das Instrument für die physikalische Deutung vorweg ausführlich diskutiert sind, können wir dann im abschließenden Kapitel III die Kerndynamik selbst in straffer Form entwickeln.

Kapitel I

GRUPPENTHEORETISCHE METHODEN

Die Kenntnis der Symmetrien eines Quantensystems gestattet uns, gruppentheoretische Methoden mit Erfolg anzuwenden [3][4].

a) Die Gruppentheorie klärt die Gründe für energetische Entartung und nennt den Entartungsgrad. Sie erleichtert uns, die Aufspaltung entarteter Energie-Niveaus unter den Einfluß kleiner Störungen zu untersuchen.

b) Die Gruppentheorie liefert Quatenzahlen zur Charakterisierung der Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamilton-Operators. Sie ermöglicht es, eine vollständige Basis des Hilbertraums zu konstruieren und die Basiszustände zu klassifizieren.

c) Schließlich können wir mit Hilfe der Gruppentheorie Matrixelemente berechnen und Auswahlregeln aufstellen.

Wir wollen jetzt die Begriffe und Methoden aus der Gruppentheorie erläutern, die wir bei der Behandlung unseres Kollektivmodells benutzen.

A. Lie-Gruppen [5][6][7]

Verlangen wir von einer unendlichen Gruppe, daß sich alle ihre Elemente durch p reelle, linear unabhängige Parameter $(\alpha_1, \ldots, \alpha_p) \equiv \alpha$ vollständig und eindeutig kennzeichnen lassen und daß die Parameter sich beim Durchlaufen der Gruppe kontinuierlich ändern, dann sprechen wir von einer kontinuierlichen Gruppe der Ordnung p. Die Bezeichnung der Gruppenelemente sei $R(\alpha)$. Fordern wir zusätzlich, daß die Parameter γ des Produktelements $R(\gamma)=R(\alpha)\cdot R(\beta)$ dreimal stetig differenzierbare Funktionen der Parameter α und β sind, dann heißt die Gruppe eine Liesche Gruppe. Die Elemente, die in der Umgebung des Einselements E liegen, bilden die lokale Liesche Gruppe. Alle Elemente aus einer p-parametrigen lokalen Lie-Gruppe lassen sich wie folgt schreiben:

$$R(\varepsilon) = E + i\sum_{k=1}^{p} \varepsilon_k J_k \quad , \quad \varepsilon_k \text{ reell}, \ |\varepsilon_k| \ll 1 \tag{I.1}$$

Die p Größen $J_1, J_2, \ldots, J_p$, die keine Gruppenelemente sind, heißen Erzeugende oder auch infinitesimale Operatoren. Sie erfüllen stets Vertauschungsrelationen der Art:

$$[J_r, J_s]_- = \sum_{t=1}^{p} C_{rs}^{t} J_t \quad , \quad r,s = 1,\ldots,p \tag{I.2}$$

Die C_{rs}^{t} heißen Strukturkonstanten der Gruppe. Da Minuskommutatoren nach Definition den Relationen

$$\begin{aligned} &[A,B] = -[B,A] \\ &[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]] = 0 \qquad \text{Jakobi-Identität} \end{aligned} \tag{I.3}$$

gehorchen, lassen sich für die Strukturkonstanten aus (I.2) folgende Eigenschaften herleiten:

$$\left.\begin{aligned} &C_{rs}^{t} = -C_{sr}^{t} \\ &C_{rs}^{t} C_{vz}^{u} + C_{zr}^{t} C_{vs}^{u} + C_{sz}^{t} C_{vr}^{u} = 0 \end{aligned}\right\} \quad r,s,t,u,v,z = 1,\ldots,p \tag{I.4}$$

Die p linear unabhängigen Erzeugenden $J_1, J_2, \ldots, J_p$ dienen als Basis eines p-dimensionalen Vektorraumes. In diesem Vektorraum ist ein Produkt zweier Elemente A und B, nämlich ihr Kommutator [A,B], definiert. Bezüglich dieser Multiplikation gelten die Jakobi-Identität und die Distributivgesetze. Durch die Definition einer solchen Multiplikation ist der Vektorraum zu einer Lie-Algebra erweitert.

Während wir bisher von der Lie-Gruppe ausgehend die zugehörige Algebra konstruiert und die Strukturkonstanten ermittelt haben, behaupten die Lieschen Fundamentaltheoreme die Umkehrbarkeit: Jeder Satz von Konstanten, die die Beziehungen (I.4) erfüllen, legt über (I.2) eindeutig eine Lie-Algebra fest, und jede Lie-Algebra bestimmt ihrerseits eindeutig eine lokale Liesche Gruppe.

Die Struktur einer Lie-Algebra spiegelt die Eigenschaften der zugehörigen Lie-Gruppe wider. Zu jedem Begriff in einer lokalen Lie-Gruppe gehört ein entsprechender Begriff in der Lie-Algebra, so daß man die Untersuchung einer lokalen Lieschen Gruppe zurückführen kann auf die gleichwertige aber einfachere Untersuchung der zugehörigen Lie-Algebra.

Spezielle Klassen von Lie-Gruppen sind für die Physik von besonderer Wichtigkeit: Bei kompakten Lie-Gruppen durchlaufen die Parameter $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_p$ nur einen beschränkten Bereich. Die Lie-Gruppen, die keinen kontinuierlichen abelschen Normalteiler besitzen, heißen halbeinfach. Die Begriffe "kompakt" und "halbeinfach" übertragen sich auf die zugehörigen Algebren.

Die restlichen Ausführungen dieses Abschnitts I.A. beziehen sich auf halbeinfache Lie-Gruppen. Wir hatten gesehen, daß die Erzeugenden $J_1, J_2, \ldots, J_p$ eine p-dimensionale Lie-Algebra aufspannen. Vorteilhaft für die Ermittlungen und Klassifizierung aller möglichen halbeinfachen lokalen Lie-Gruppen (die in dieser Arbeit nicht interessiert) und für die Anwendung in der Physik ist die Konstruktion einer neuen Basis.

Zunächst wählen wir von den p Erzeugenden $J_1,\dots,J_p$ diejenigen aus, die paarweise miteinander vertauschbar sind. Wir bezeichnen sie mit $H_1,\dots,H_\ell$. Ihre Anzahl ℓ heißt Rang der Lie-Algebra und Lie-Gruppe. Nach einem Theorem von Cartan können die infinitesimalen Operatoren $H_1,\dots,H_\ell$ durch linear unabhängige Stufenoperatoren $E_1, E_{-1},\dots,E_v, E_{-v}$ $(v=\frac{p-\ell}{2})$, die sich durch Linearkombination aus den übriggebliebenen (p-l) der ursprünglichen Erzeugenden bilden lassen, zu einer neuen Basis der Lie-Algebra ergänzt werden; und zwar derart, daß die Basiselemente $H_1,\dots,H_\ell, E_{\pm 1},\dots,E_{\pm v}$ dieses Standard-Koordinatensystems folgenden Vertauschungsregeln genügen:

$$\begin{aligned}
&[H_i, H_k] = 0 && i,k = 1,\dots,\ell \\
&[H_i, E_a] = r_i(a)\, E_a && i = 1,\dots,\ell\,;\; a = \pm 1,\dots,\pm v \\
&[E_a, E_b] = N_{ab}\, E_{a+b} && a,b = \pm 1,\dots,\pm v\,;\; a \neq -b \\
&[E_a, E_{-a}] = \sum_{i=1}^{\ell} r_i(a) H_i && a = 1,\dots,v
\end{aligned} \tag{I.5}$$

Die l reellen Größen $r_1(a),\dots,r_\ell(a)$ $(a=\pm 1,\dots,\pm v)$ betrachtet man als Komponenten eines Vektors $\vec{r}(a)$, genannt Wurzel, in einem l-dimensionalen Raum. Die Gesamtheit der Wurzeln, das sogenannte Radikalsystem der Algebra, ist kennzeichnend für eine Algebra und den Strukturkonstanten gleichwertig. Von den Eigenschaften der Wurzeln sei nur genannt: $\vec{r}(-a) = -\vec{r}(a)$, $a=1,\dots,v$. Die Größen N_{ab} können durch die $r_i(a)$ ausgedrückt werden.

Ein weiterer nützlicher Begriff: Für jede halbeinfache Lie-Algebra mit dem Rang l gibt es einen Satz von genau l Casimiroperatoren. Das sind solche (nichtlinearen) Funktionen $C_\lambda(J_1,\dots,J_p)$ aller Erzeugenden, die mit allen Erzeugenden (also auch mit allen Gruppenelementen) vertauschbar sind. Die Casimiroperatoren bilden einen vollständigen Satz in dem Sinne, daß jeder mit allen Erzeugenden vertauschbare Operator notwendig eine Linearkombination der Casimiroperatoren ist.

Die wichtigsten halbeinfachen Lie-Gruppen, sowie deren Parameterzahl und Rang, sind in Form einer Tabelle festgehalten:

Name	Symbol	Definition	Algebra	Parameter	Rang
unitäre unimodulare Gruppe	SU(l+1)	$G^+ = G^{-1}, \|G\| = +1$	A_l	l^2+2l	l
Rotationsgruppe ungerader Dimens.	R(2l+1)≡ SO(2l+1)	G reell $G^T = G^{-1}, \|G\| = +1$	B_l	$2l^2+l$	l
Symplektische Gruppe	Sp(2l)	$G^T MG = M$ für alle n.sing. antisymm.M	C_l	$2l^2+l$	l
Rotationsgruppe gerader Dimension	R(2l)≡ SO(2l)	G reell $G^T = G^{-1}, \|G\| = +1$	D_l	$2l^2-l$	l

(I.6)

Zum Schluß dieses Abschnitts wollen wir die erwähnten Begriffe und Sätze an Hand der uns vertrauten dreidimensionalen Rotationsgruppe R(3) erläutern.

R(3) ist eine halbeinfache Lie-Gruppe der Ordnung 3; denn alle ihre Elemente lassen sich durch drei Parameter , etwa die drei Eulerwinkel, kennzeichnen. Eine infinitesimale Drehung um die z-Achse bewirkt der Operator

$$R(\varepsilon) = 1 + i\varepsilon J_z$$

wobei J_z die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses $\vec{J}$ ist. Die Komponenten J_x, J_y, J_z von $\vec{J}$ sind also die drei Erzeugenden der Drehgruppe. Es bestehen folgende Vertauschungsrelationen:

$$[J_i, J_k] = i \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} J_k \quad , \quad i,j,k = x,y,z$$

Die Elemente des total antisymmetrischen Tensors

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0 & \text{für 2 gleiche Indizes} \\ 1 & \text{für } i,j,k \text{ gerade Permutation von } x,y,z \\ -1 & \text{für } i,j,k \text{ ungerade Permutation von } x,y,z \end{cases}$$

sind somit Strukturkonstanten, für die sich die Beziehungen (I.4) leicht nachrechnen lassen. Die Drehimpulskomponenten sind nicht miteinander vertauschbar, d.h. R(3) hat in Übereinstimmung mit Tabelle (I.6) den Rang 1. Dagegen kommutiert J^2 mit allen Komponenten von $\vec{J}$ und stellt so den einzigen Casimiroperator der Gruppe dar. Das Standard-Koordinatensystem der Lie-Algebra B_1 besteht aus J_z und den beiden Stufenoperatoren

$$J'_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (J_x \pm i J_y)$$

Die Relationen (I.5) lauten im Falle der R(3):

$$[J_z, J'_+] = J'_+$$
$$[J_z, J'_-] = -J'_-$$
$$[J'_+, J'_-] = J_z$$

Folglich sind die einzigen Komponenten der zu J'_+ und J'_- gehörenden Wurzelvektoren +1 bzw. -1. In der Drehimpulsalgebra verwendet man meist die beiden nichtnormierten Größen $J_{\pm} = J_x \pm i J_y$ als Stufenoperatoren.

B. Darstellungen [5][6][7][8][9]

Bilden wir eine beliebige Gruppe G homomorph auf eine Gruppe linearer Operatoren ab, die innerhalb eines Vektorraumes L der Dimension n wirken, dann nennen wir die Operatorgruppe D(g), $g \in G$, eine n-dimensionale Darstellung der Gruppe G im Darstellungsraum L. Wählt man in L eine Basis, dann kann man die Vektoren des Raumes durch einspaltige Matrizen mit n Zeilen und die linearen Operatoren durch $n \times n$-Matrizen repräsentieren. Zwei Darstellungen D(g) und D'(g) heißen äquivalent, wenn sie die gleiche Dimension haben und wenn jede Matrix D'(g) durch eine feste lineare Transformation T aus D(g) entsteht: $D'(g) = TD(g)T^{-1}$ für alle g. Dies tritt z.B. ein, wenn man im Darstellungsraum die Basis ändert. Mit "verschiedenen" Darstellungen meinen wir im folgenden stets inäquivalente.

Ein Vektorraum heißt invariant bezüglich einer Gruppe G, wenn jeder Vektor des Raumes durch jedes beliebige Gruppenelement wieder in einen Vektor desselben Raumes überführt wird. Anders ausgedrückt: Die Vektoren eines invarianten Teilraumes transformieren sich bei Anwendung der gesamten Gruppe nur unter sich. Ein invarianter Raum, der echte invariante Unterräume enthält, heißt reduzibel. Dementsprechend ist ein invarianter Vektorraum irreduzibel bezüglich G, wenn er keinen kleineren invarianten Teilraum enthält. Äquivalent damit: Greift man aus einem irreduziblen Vektorraum einen beliebigen Vektor heraus und wendet auf ihn sämtliche Gruppenelemente an, dann wird der gesamte Teilraum wieder aufgespannt. Ein irreduzibler Vektorraum heißt auch Multiplett der Gruppe.

Je nachdem, ob der Darstellungsraum reduzibel oder irreduzibel ist, nennen wir auch die Darstellung der Gruppe selbst reduzibel oder irreduzibel. Im reduziblen Falle lassen sich die Darstellungsmatrizen in der Form

$$D(g) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & P(g) \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{pmatrix}_{n}^{m}$$

angeben; denn Matrizen dieser Gestalt transformieren jeden Vektor

$\vec{x} = (x_1, \ldots, x_m, 0, \ldots, 0)$ eines Unterraumes $L^{(m)}$ in einen anderen Vektor $\vec{y} = (y_1, \ldots, y_m, 0, \ldots, 0)$ des gleichen Raumes.

Ein wichtiges Kriterium für die Irreduzibilität einer Darstellung ergibt sich aus dem Lemma von Schur, das, speziell für diesen Zweck formuliert, lautet:
Nur die Einheitsmatrix und deren Vielfache sind mit allen Matrizen D(g) einer irreduziblen Darstellung vertauschbar.

Von jetzt ab wenden wir uns wieder den Lie-Gruppen zu, besonders den halbeinfachen. Als Darstellungsräume denken wir uns im Hinblick auf spätere Anwendungen stets den Hilbert-Raum oder dessen Teilräume.

Durch successive Anwendung infinitesimaler Transformationen werden bei zusammenhängenden Lie-Gruppen beliebige Gruppenelemente $R(\alpha)$, nicht nur die aus der lokalen Gruppe, erreicht. Ausgedrückt durch die Darstellungsmatrizen $D(\alpha)$ bedeutet dieser Sachverhalt:

$$D(\alpha) = e^{i \sum_{k=1}^{p} \alpha_k J_k} \qquad (I.7)$$

Daraus folgt für die Erzeugenden, die hier ebenfalls durch Matrizen im Darstellungsraum repräsentiert werden:

$$J_r = -i \left(\frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_r} \right)_{\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_p = 0} \qquad (I.8)$$

Darstellungen kompakter Gruppen sind unitär (d.h. alle Darstellungsmatrizen sind unitär) oder einer unitären Darstellung äquivalent. Man kann deshalb alle Erzeugenden hermitesch wählen; denn die Unitaritätsbedingung $D(\varepsilon)D^+(\varepsilon)=E$ führt für $D(\varepsilon)=E+i\varepsilon J$ bei Vernachlässigung quadratischer Terme in ε auf die Gleichung $(E+i\varepsilon J)(E-i\varepsilon J^+) = E+i\varepsilon J - i\varepsilon J^+ = E$. Daraus folgt $J = J^+$, also J hermitesch.

Desgleichen lassen sich bei kompakten halbeinfachen Lie-Gruppen die Casimiroperatoren hermitesch machen, wodurch reelle Eigenwerte garantiert werden. Sei nämlich C ein Casimiroperator, dann gilt nach

Definition $CD(\alpha)=D(\alpha)C$ für alle Operatoren $D(\alpha)$ der Gruppe. Die dazu adjungierte Gleichung $D^+C^+ = C^+D^+$ besagt wegen $D^+ = D^{-1}$ (Unitarität), daß C^+ mit allen Inversen D^{-1} vertauschbar ist. Die Menge der Inversen aber ist identisch mit der gesamten Gruppe. Also sind sowohl C als auch C^+ Casimiroperatoren. Wir können deshalb statt C den Operator $(C+C^+)$ als Casimiroperator wählen, der hermitesch ist.

Eine weitere wichtige Eigenschaft haben alle kompakten und auch alle halbeinfachen Gruppen gemeinsam: Ihre reduziblen Darstellungen sind <u>vollständig reduzibel</u>, d.h. der Darstellungsraum <u>zerfällt</u> in eine direkte Summe von Multipletts: $L = L^{(1)} \oplus L^{(2)} \oplus \ldots \oplus L^{(s)}$.
Bei unitären Darstellungen sind Vektoren aus verschiedenen dieser Multipletts $L^{(j)}$ zueinander orthogonal. Diese Eigenschaften werden sich als sehr nützlich bei der Konstruktion und Klassifikation vollständiger orthogonaler Basen des Hilbertraumes erweisen. Die Darstellungsmatrizen vollständig reduzibler Darstellungen können auf Quasidiagonalform gebracht werden:

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(\alpha) & & & 0 \\ & D^{(2)}(\alpha) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & D^{(s)}(\alpha) \end{pmatrix}$$

wobei $D^{(1)}(\alpha), \ldots, D^{(s)}(\alpha)$ irreduzible Darstellungen der Gruppe sind.

Die hermiteschen und nach Definition paarweise miteinander kommutierenden Erzeugenden $H_1, \ldots, H_l$ einer kompakten halbeinfachen Lie-Gruppe vom Rang l besitzen in jedem Darstellungsraum $L^{(j)}$ gemeinsame Eigenvektoren $|(j)\tau, m_1, \ldots m_l\rangle$, die eine Basis bilden. Die reellen Zahlen m_i sollen die Eigenwerte zu den infinitesimalen Operatoren H_i sein:

$$H_i \, |(j)\tau, m_1, \ldots, m_l\rangle = m_i \, |(j)\tau, m_1, \ldots, m_l\rangle \tag{I.9}$$

Jeder Satz der l Größen $m_1, \ldots, m_l$ wird <u>Gewichtsvektor</u> $\vec{w} = (m_1, \ldots, m_l)$ genannt. Da die Erzeugenden $H_1, \ldots, H_l$ meist keinen vollständigen Satz von Operatoren zur Klassifizierung einer Basis des Darstellungsraumes bilden, gibt es im allgemeinen mehrere, sagen wir $z(\vec{w})$, linear unab-

hängige Vektoren mit dem gleichen Gewicht. Der Index $\tau = 1,..,z(\vec{w})$ unterscheidet diese Zustände. Die Multiplizität $z(\vec{w})$ der Gewichte heißt auch "innere Multiplizität". Gehört zu einem Gewicht nur ein Vektor des Darstellungsraumes, dann nennt man es einfaches Gewicht. Ein Gewicht $\vec{w}=(m_1,\dots,m_\ell)$ heißt höher als ein Gewicht $\vec{w}'=(m_1',..,m_\ell')$ wenn die erste nicht verschwindende Differenz m_i-m_i' positiv ist.

Es seien jetzt diejenigen Sätze über die Gewichtsvektoren aufgezählt, die wir später benutzen:

a) Jede Darstellung hat mindestens ein Gewicht.

b) Vektoren zu verschiedenen Gewichten sind linear unabhängig.

c) Ist x ein Vektor zum Gewicht $\vec{w}$, dann hat $E_a x$ das Gewicht $\vec{w}+\vec{r}(a)$.
Diesen besonders wichtigen Satz wollen wir beweisen:
$H_i E_a x = E_a H_i x + [H_i, E_a] x$. Aus (I.9) $H_i x = m_i x$ und (I.5) $[H_i, E_a] = r_i(a) E_a$ folgt $H_i E_a x = m_i E_a x + r_i(a) E_a x = (m_i + r_i(a)) E_a x$

Hier tritt die Funktion der E_a als Stufenoperatoren zutage; denn das Theorem c) besagt

$$E_{\pm a} \,|(j)\tau, m_1,\dots,m_\ell\rangle = |(j)\tau', m_1 + r_1(a),\dots, m_\ell + r_\ell(a)\rangle \qquad (I.10)$$

Ausgehend vom höchsten Gewicht gewinnen wir durch successive Anwendung der Erniedrigungsoperatoren E_{-a} alle anderen Gewichte.

d) Das höchste Gewicht einer irreduziblen Darstellung ist einfach.

e) Zwei irreduzible Darstellungen mit dem gleichen höchsten Gewicht sind äquivalent.
Jede irreduzible Darstellung ist daher durch ihr höchstes Gewicht eindeutig charakterisiert.

Eine andere Möglichkeit, die irreduziblen Darstellungen halbeinfacher Lie-Gruppen zu klassifizieren, zeigte Racah auf. Nach dem Lemma von Schur ist der Repräsentant jedes Casimiroperators in einer irreduziblen Darstellung ein Vielfaches der Einheitsmatrix: $C_\kappa = j_\kappa I$, $\kappa = 1,..,\ell$. Alle Vektoren des Multipletts sind somit Eigenvektoren des Casimiroperators C_κ zum gleichen Eigenwert j_κ. Racah bewies nun, daß die

l gleichzeitigen Eigenwerte $j_1,\dots,j_l$ der Casimiroperatoren die irreduziblen Darstellungen vollständig kennzeichnen, d.h. es gibt keine verschiedenen irreduziblen Darstellungen zum selben Satz $j_1,\dots,j_l$. Diese Tatsache wollen wir im weiteren Racahs Theorem nennen.

Das Kronecker-Produkt zweier irreduzibler Darstellungen $D^{(\mu)}$ und $D^{(\nu)}$ einer Gruppe G ist im allgemeinen reduzibel. Die Zerlegung in irreduzible Darstellungen $D^{(\sigma)}$, die sogenannte Clebsch-Gordan-Reihe, laute

$$D^{(\mu)} \otimes D^{(\nu)} = \sum_{\sigma} \Gamma_{\mu\nu}^{\sigma} D^{(\sigma)} \qquad \text{(I.11)}$$

wobei die ganzen Zahlen $\Gamma_{\mu\nu}^{\sigma}$ "äußere Multiplizitäten" heißen.

Gegeben sei eine Basis $|(\mu)1\rangle,\dots,|(\mu)n_\mu\rangle$ für die Darstellung $D^{(\mu)}$ und eine Basis $|(\nu)1\rangle,\dots,|(\nu)n_\nu\rangle$ für $D^{(\nu)}$. Die Basisfunktionen $|(\lambda\tau_\lambda)1\rangle,\dots,|(\lambda\tau_\lambda)n_\lambda\rangle$ für eine irreduzible Darstellung $D^{(\lambda)}$, die in der Summe (I.11) vorkommt, lassen sich stets als Linearkombination von Produkten $|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle$ darstellen; denn die Fuktionen $|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle$ sind eine vollständige Basis des Darstellungsraumes $L^{(\mu)}\otimes L^{(\nu)}$, der $L^{(\lambda\tau_\lambda)}$ als irreduziblen invarianten Unterraum enthält. τ_λ unterscheidet die linear unabhängigen Sätze von Basisfunktionen $|(\lambda\tau_\lambda)1\rangle,\dots,|(\lambda\tau_\lambda)n_\lambda\rangle$ im Falle, daß $D^{(\lambda)}$ mehrfach ($\Gamma_{\mu\nu}^{\lambda} > 1$) in $D^{(\mu)}\otimes D^{(\nu)}$ erscheint.

$$|(\lambda\tau_\lambda)\ell\rangle = \sum_{ik} \langle(\mu)i,(\nu)k|(\lambda\tau_\lambda)\ell\rangle |(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle \qquad \text{(I.12)}$$

Die Faktoren $\langle(\mu)i,(\nu)k|(\lambda\tau_\lambda)\ell\rangle$ heißen Wigner-Koeffizienten der entsprechenden Gruppe G, wobei man noch genauer spezifizieren muß, nach welchen Gesichtspunkten man die Basen der Multipletts gewählt hat. Nimmt man für die irreduziblen Darstellungen verschiedene Basen, so fallen die Wigner-Koeffizienten für jede Wahl anders aus.

Umgekehrt lassen sich alle Produkte $|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle$ nach den Basisfunktionen $|(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle$ der irreduziblen Räume $L^{(\sigma\tau_\sigma)}$ entwickeln, weil deren Gesamtheit ebenfalls den Darstellungsraum $L^{(\mu)}\otimes L^{(\nu)}$ des Kronecker-Produktes $D^{(\mu)}\otimes D^{(\nu)}$ vollständig aufspannt:

$$|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle = \sum_{\sigma,\tau_\sigma,\ell} \langle(\sigma\tau_\sigma)\ell|(\mu)i,(\nu)k\rangle |(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle \qquad \text{(I.13)}$$

Wegen der Eigenschaft $\langle(\sigma\tau_\sigma)\ell|(\mu)i,(\nu)k\rangle = \langle(\mu)i,(\nu)k|(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle^*$ des Hilbertraumes können wir statt (I.13) schreiben:

$$|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle = \sum_{\sigma,\tau_\sigma,\ell} \langle(\mu)i,(\nu)k|(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle^* \, |(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle \tag{I.14}$$

Sind die vollständigen Basen $|(\mu)i\rangle|(\nu)k\rangle$ einerseits und $|(\sigma\tau_\sigma)\ell\rangle$ andrerseits orthonormiert, dann ist die $n_\mu n_\nu$-reihige Transformationsmatrix, deren Elemente die Wigner-Koeffizienten sind, unitär.

Sei $|(j)s\rangle, s=1,\dots,n_j$ eine Basis des Multipletts $L^{(j)}$ der Gruppe G. Da der Zustand $D(\alpha)|(j)s\rangle, D(\alpha)\in G$ nach Definition gleichfalls in $L^{(j)}$ liegt, können wir ihn nach den Basisfunktionen $|(j)1\rangle,\dots,|(j)n_j\rangle$ entwickeln und gewinnen damit das Transformationsverhalten der Basis $|(j)s\rangle$ bei einer Gruppenoperation:

$$D(\alpha)\,|(j)s\rangle = \sum_k \langle(j)k|D(\alpha)|(j)s\rangle\,|(j)k\rangle \tag{I.15}$$

<u>Irreduzible Tensoroperatoren</u> bezüglich einer Gruppe G sind solche Sätze von Operatoren $T_s^{(j)}, s=1,\dots,n_j$, die sich bei Anwendung der Gruppe genauso transformieren wie eine Basis irgendeines irreduziblen Unterraumes $L^{(j)}$ von G, also

$$D(\alpha)\,T_s^{(j)}\,D(\alpha)^{-1} = \sum_k \langle(j)k|D(\alpha)|(j)s\rangle\,T_k^{(j)} \tag{I.16}$$

Die Anzahl n_j der unabhängigen Komponenten irreduzibler Tensoroperatoren ist demnach gleich der Dimension des entsprechenden Multipletts. Da sich irreduzible Tensoroperatoren nach Definition wie eine Basis eines Multipletts der Gruppe transformieren, lassen sich aus zwei irreduziblen Tensoroperatoren $T^{(j_1)}$ und $T^{(j_2)}$ mit Hilfe von Wigner-Koeffizienten der Gruppe sofort neue irreduzible Tensoroperatoren konstruieren:

$$T_\ell^{(j\tau_j)} = \sum_{ik} \langle(j_1)i,(j_2)k|(j\tau_j)\ell\rangle\,T_i^{(j_1)}\,T_k^{(j_2)} \tag{I.17}$$

Die besondere Art (I.17), irreduzible Tensoroperatoren zu multiplizieren, so daß ein neuer irreduzibler Tensoroperator entsteht, heißt Tensorprodukt von $T^{(j_1)}$ und $T^{(j_2)}$.

Wir drücken jetzt $D(\alpha)$ und $D(\alpha)^{-1}$ durch infinitesimale Operatoren aus und setzen in (I.16) ein:

$$\mathcal{D}(\alpha) = I + i\sum_k \alpha_k J_k \ , \ \mathcal{D}(\alpha)^{-1} = I - i\sum_k \alpha_k J_k \ , \ |\alpha_k| \ll 1$$

$$(I + i\sum_k \alpha_k J_k)\, T_s^{(j)} (I - i\sum_k \alpha_k J_k) = \sum_r \langle (j) r | I + i\sum_k \alpha_k J_k | (j) s \rangle\, T_r^{(j)}$$

Vernachlässigt man die in α_k quadratischen Terme, so folgt

$$T_s^{(j)} + i\sum_k \alpha_k J_k \cdot T_s^{(j)} - i T_s^{(j)} \cdot \sum_k \alpha_k J_k = T_s^{(j)} + i\sum_{kr} \langle (j) r | \alpha_k J_k | (j) s \rangle\, T_r^{(j)} \Rightarrow$$

$$\Big[\sum_k \alpha_k J_k , T_s^{(j)} \Big] = \sum_{kr} \langle (j) r | \alpha_k J_k | (j) s \rangle\, T_r^{(j)} \Rightarrow$$

$$\big[J_k , T_s^{(j)} \big] = \sum_r \langle (j) r | J_k | (j) s \rangle\, T_r^{(j)} \qquad \text{(I.18)}$$

Setzt man in (I.18) für J_k speziell die infinitesimalen Operatoren des Standard-Koordinatensystems der Lie-Algebra ein und für die Basiszustände $|(j)s\rangle$ und Tensorkomponenten $T_s^{(j)}$ solche mit einem bestimmten Gewicht, so erhalten wir:

$$\big[H_i , T^{(j)}_{\tau, m_1, \dots, m_l} \big] = m_i\, T^{(j)}_{\tau, m_1, \dots, m_l} \qquad \text{(I.19)}$$

$$\big[E_a , T^{(j)}_{\tau m_1 \dots, m_l} \big] = \sum_{\tau'} \langle (j) \tau', m_1 + r_1(a), \dots, m_l + r_l(a) | E_a | (j) \tau, m_1, \dots, m_l \rangle\, T^{(j)}_{\tau', m_1 + r_1(a), \dots, m_l + r_l(a)} \qquad \text{(I.20)}$$

Die Beziehungen (I.19) und (I.20) für den Kommutator der Komponenten irreduzibler Tensoroperatoren mit den infinitesimalen Operatoren sind also ganz ähnlich wie die Wirkungen (I.9) und (I.10) der Erzeugenden auf die entsprechenden Basisvektoren des Multipletts.

Die Matrixelemente $\langle (j_1) r | T_s^{(j)} | (j_2) t \rangle$ der Komponenten irreduzibler Tensoroperatoren spalten auf in einen geometrischen Faktor (den Wigner-Koeffizienten der betreffenden Gruppe G) und ein reduziertes Matrixelement, geschrieben $\langle (j_1 \tau_{j_1}) \| T^{(j)} \| (j_2) \rangle$, das bei quantenmecha-

nischen Vorgängen die physikalischen Eigenheiten enthält und nur von $j_1, \tau_{j_1}, j_2, T^{(j)}$ (nicht aber von r,s,t) abhängt. Ist die Phasenkonvention so getroffen, daß die Wigner-Koeffizienten reell sind, dann lautet dieser Sachverhalt, das Wigner-Eckart-Theorem für die Gruppe G, wie folgt:

$$\langle (j_1) r | T_s^{(j)} | (j_2) t \rangle = \sum_{\tau_{j_1}} \langle (j) s, (j_2) t | (j_1 \tau_{j_1}) r \rangle \langle (j_1 \tau_{j_1}) \| T^{(j)} \| (j_2) \rangle \qquad (I.21)$$

Die Summation über τ_{j_1} in (I.21) ist erforderlich, falls die Darstellung $D^{(j_1)}$ mehrfach in $D^{(j)} \otimes D^{(j_2)}$ vorkommt; denn es gibt dann mehrere unabhängige Wigner-Koeffizienten $\langle (j) s, (j_2) t | (j_1 \tau_{j_1}) r \rangle$ und verschiedene reduzierte Matrixelemente $\langle (j_1 \tau_{j_1}) \| T^{(j)} \| (j_2) \rangle$.

Am Wigner-Eckart-Theorem ersieht man sofort folgende Auswahlregel: Erscheint die irreduzible Darstellung $D^{(j_1)}$ überhaupt nicht in der Zerlegung (I.11) von $D^{(j)} \otimes D^{(j_2)}$, dann verschwinden alle Matrixelemente $\langle (j_1) r | T_s^{(j)} | (j_2) t \rangle$, welche Werte r,s und t auch immer annehmen.

Wie schon im Abschnitt I.A. soll auch hier wieder die Rotationsgruppe R(3) Beispiele für die neuen Begriffe und Sätze hergeben.

Gemäß Racahs Theorem transformieren sich die Eigenfunktionen des einzigen Casimiroperators J^2 (=Gesamtdrehimpulsquadrat) zum gleichen Eigenwert j(j+1) bei Drehungen des anschaulichen dreidimensionalen Raumes nur untereinander und bilden irreduzible Unterräume $L^{(j)}$ des Hilbertraumes. Diese (2j+1)-dimensionalen Multipletts sind Darstellungsräume für irreduzible Darstellungen der Drehgruppe. Wählt man wie üblich die Eigenfunktionen $|jm\rangle$ von J_z als Basis der Multipletts, dann bekommt man als irreduzible Darstellungen der R(3) die bekannten Rotationsmatrizen $D^{(j)}(\alpha\beta\gamma)$ mit den Elementen $D^{(j)}_{mm'}(\alpha\beta\gamma)$, $m,m'=-j,\dots,+j$. Die Basiszustände $|jm\rangle$ besitzen, da Eigenvektoren des infinitesimalen Operators J_z, ein bestimmtes Gewicht, nämlich m. Die Theoreme a) bis e) über die Gewichte findet man in unserem Spezialfall bestätigt, die Beziehungen (I.9) und (I.10) lauten hier:

$$J_z |jm\rangle = m |jm\rangle$$

$$J_\pm |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\; |j\, m\pm 1\rangle$$

Die Gewichte der irreduziblen Darstellungen $D^{(j)}$ der Drehgruppe sind alle einfach. Deshalb erhält man durch successive Anwendung des Erniedrigungsoperators J_- auf den Zustand höchsten Gewichts $|jj\rangle$ nicht nur alle anderen Gewichte sondern zugleich auch alle Basiszustände des Multipletts. Die Clebsch-Gordan-Reihe (I.11) heißt im Falle der R(3):

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = D^{(|j_1-j_2|)} \oplus D^{(|j_1-j_2|+1)} \oplus \ldots \oplus D^{(j_1+j_2)}$$

In der Summe treten alle irreduziblen Darstellungen $D^{(j)}$, $j = |j_1-j_2|, \ldots, j_1+j_2$ nur einfach auf, weshalb ein Unterscheidungsindex τ_j überflüssig ist. Die Transformation (I.12) von den "ungekoppelten" Basisfunktionen $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ des Produktraumes $L^{(j_1)} \otimes L^{(j_2)}$ auf die Basiszustände $|jm\rangle$ von Multipletts (also auf Funktionen mit bestimmtem Gesamtdrehimpuls) schreibt sich

$$|jm\rangle = \sum_{m_1m_2} \langle j_1m_1, j_2m_2 | jm\rangle \; |j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$$

Diese durch speziell gewählte Basen festgelegten Wigner-Koeffizienten $\langle j_1m_1, j_2m_2 | jm\rangle$ der R(3) nennt man Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Das Transformationsverhalten (I.15) der Basis $|jm\rangle$ bei Rotationen zeigt die nächste Gleichung:

$$R(\alpha\beta\gamma)\;|jm\rangle = \sum_{m'} D^{(j)}_{m'm}(\alpha\beta\gamma)\;|jm'\rangle$$

Die Definitionsgleichung (I.16) eines irreduziblen Tensoroperators bezüglich R(3) und die Folgerungen (I.19) und (I.20) sind hier:

$$R\,T^{(j)}_m R^{-1} = \sum_{m'} D^{(j)}_{m'm}\; T^{(j)}_{m'}$$

$$[J_z, T^{(j)}_m] = m\,T^{(j)}_m$$

$$[J_\pm, T^{(j)}_m] = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\;\; T^{(j)}_{m\pm1}$$

Das Tensorprodukt (I.17) zweier irreduzibler Tensoroperatoren $T^{(j_1)}$ und $T^{(j_2)}$ bezüglich R(3) schreibt man oft in verkürzter Form:

$$T^{(j)}_m = \sum_{m_1m_2} \langle j_1m_1, j_2m_2 | jm\rangle\; T^{(j_1)}_{m_1}\, T^{(j_2)}_{m_2} \equiv [T^{[j_1]} \times T^{[j_2]}]^{[j]}_m$$

Schließlich sei noch das Wigner-Eckart-Theorem (I.21) für die Drehgruppe hingeschrieben, bei dem man aus erwähnten Gründen ohne die Summation über τ_j auskommt und das reduzierte Matrixelement ohne den Faktor $(-)^{2j}/\sqrt{2j_1+1}$ definiert:

$$\langle j_1m_1 | T^{(j)}_m | j_2m_2\rangle = \frac{(-)^{2j}}{\sqrt{2j_1+1}}\;\langle jm, j_2m_2 | j_1m_1\rangle \langle j_1 \| T^{(j)} \| j_2\rangle$$

C. Symmetriegruppen [3][4]

Mit diesem Abschnitt beginnt die Anwendung der Gruppentheorie in der Physik. Sei S eine Transformation der Koordinaten, $q \rightarrow q' = Sq$, bei festen Koordinatenachsen (aktive Deutung der Transformation). Zu S gibt es einen Operator T_S , der die zugehörige Transformation der Wellenfunktion bewirkt: $\Psi(q) \rightarrow \Psi'(q) = T_S \Psi(q)$. Wir beschränken uns dabei stets auf die physikalisch sinnvollen Transformationen, die unitären. Da die transformierte Funktion $\Psi' = T_S \Psi$ am neuen Ort Sq den gleichen Wert haben muß wie die alte Funktion Ψ an der ursprünglichen Stelle q wird dieser Operator T_S gefunden durch die Vorschrift:

$$T_S \Psi(Sq) = \Psi(q) \quad \text{oder} \quad T_S \Psi(q) = \Psi(S^{-1}q) \tag{I.22}$$

Die Transformation eines Operators R bei der Koordinatentransformation $q' = Sq$ ist dann bekanntlich $R' = T_S R T_S^{-1}$.

Eine Transformation S, die den Hamilton-Operator H(q,p) eines Systems invariant läßt, H(Sq,Sp)=H(q,p), heißt <u>Symmetrietransformation</u>. Der zugehörige <u>Symmetrieoperator</u> T_S ist in diesem Falle mit dem Hamilton-Operator vertauschbar: $T_S H T_S^{-1} = H$, also $H T_S = T_S H$ oder $[H, T_S] = 0$. Bildet die Menge der Symmetrietransformationen eine mathematische Gruppe, so nennt man die Menge eine <u>Symmetriegruppe.</u> Im allgemeinen hat ein System mehrere Symmetriegruppen; beispielsweise ist klar, daß jede Untergruppe einer Symmetriegruppe ebenfalls Symmetriegruppe desselben Hamilton-Operators ist. Die Gruppe, die alle anderen Symmetriegruppen als Untergruppen enthält, heißt <u>maximale Symmetriegruppe</u>.

Der Hamilton-Operator H habe die Eigenwerte E_K :

$$H \Psi_e^{(K)} = E_K \Psi_e^{(K)} \tag{I.23}$$

Die zu E_K gehörenden Eigenfunktionen $\Psi_e^{(K)}$ bilden einen Unterraum $L^{(K)}$ des Hilbertraums. Seien nun T(g) die Symmetrieoperatoren einer Symmetriegruppe G von H. Aus der Vertauschbarkeit von T(g) und H folgt:

$$H T(g) \Psi_e^{(K)} = T(g) H \Psi_e^{(K)} = E_K T(g) \Psi_e^{(K)} \tag{I.24}$$

Das bedeutet: Auch alle Zustände $T(g)\Psi_\ell^{(\kappa)}$ sind Eigenfunktionen zum Energieviveau E_κ und damit Elemente von $L^{(\kappa)}$. Alle Eigenräume $L^{(\kappa)}$ des Hamilton-Operators sind somit invariant bezüglich jeder Symmetriegruppe G und bilden Darstellungsräume für deren Darstellungen. Die Dimensionen solcher Darstellungsräume, die entweder reduzibel oder irreduzibel sind, ist gleich dem Entartungsgrad des betreffenden Eigenwertes.

Da, wie schon erwähnt, jede Untergruppe G′ von G ebenfalls Symmetriegruppe des Hamilton-Operators H ist, sind die Eigenräume $L^{(\kappa)}$ von H auch bezüglich aller Untergruppen G′ invariant. Dagegen ist ein Eigeraum $L^{(\kappa)}$, der irreduzibel bezüglich G ist, gegenüber der Untergruppe $G' \subset G$ im allgemeinen reduzibel. Beim Übergang zu immer kleineren Untergruppen werden immer mehr Eigenräume reduzibel. Untersucht man umgekehrt die Eigenräume $L^{(\kappa)}$ vom Standpunkt immer umfassenderer Symmetriegruppen, so werden sie immer häufiger irreduzibel sein. Für die maximale Symmetriegruppe schließlich haben wir das

<u>Postulat der Irreduzibilität</u>: <u>Alle</u> Eigenräume $L^{(\kappa)}$ eines Hamilton-Operators zu den Eigenwerten E_κ sind irreduzibel invariante Unterräume (Multipletts) bezüglich der maximalen Symmetriegruppe.

Man nennt Energieniveaus E_κ bezüglich einer Symmetriegruppe G des Hamilton-Operators <u>natürlich entartet</u>, wenn der zugehörige Eigenraum $L^{(\kappa)}$ ein irreduzibler Unterraum bezüglich der Gruppe G ist, und <u>zufällig entartet</u>, wenn der betreffende Eigenraum $L^{(\kappa)}$ reduzibel bezüglich G ist. Nach dem Postulat der Irreduzibilität sind demzufolge alle Eigenwerte eines Hamilton-Operators bezüglich der maximalen Symmetriegruppe natürlich entartet.

Wir fassen die bisherigen Ergebnisse noch einmal zusammen: Durch Gleichung (I.24) wurde bewiesen, daß jeder Eigenraum $L^{(\kappa)}$ des Hamilton-Operators H bezüglich jeder Symmetriegruppe von H invariant ist. Darüber hinaus postulierten wir die Irreduzibilität dieser Eigenraume bezüglich der maximalen Symmetriegruppe.

Wir zeigen jetzt folgende Umkehrung: Jedes Multiplett $L^{(m)}$ irgendeiner Symmetriegruppe im Hilbertraum, speziell der maximalen Symmetriegruppe, ist energetisch entartet. Zum Beweis greifen wir einen Zustand $\psi_0^{(m)}$ aus dem Multiplett $L^{(m)}$ heraus, der Eigenvektor zum Hamilton-Operator ist: $H\psi_0^{(m)} = E_m \psi_0^{(m)}$. Einen solchen Zustand $\psi_0^{(m)}$ muß es geben, weil die Eigenfunktionen von Observablen den gesamten Hilbertraum aufspannen. Wegen der Vertauschbarkeit der Symmetrieoperatoren T(g) mit H haben wir

$$H\,T(g)\psi_0^{(m)} = T(g)\,H\psi_0^{(m)} = E_m\,T(g)\psi_0^{(m)} \tag{I.25}$$

Die Menge der Vektoren $T(g)\psi_0^{(m)}$ gehört also ganz zum gleichen Eigenwert E_m und spannt nach Definition der Irreduzibilität das Multiplett $L^{(m)}$ vollkommen auf. Der Unterschied zum Beweis (I.24) besteht darin, daß dort die Invarianz der Eigenräume $L^{(K)}$ hergeleitet wurde, während hier für die Umkehrung des Satzes die schärfere Bedingung der Irreduzibilität der $L^{(m)}$ gebraucht wird.

Die Gleichungen (I.24), (I.25) und das Postulat der Irreduzibilität zusammengenommen sind aber keineswegs, wie man meinen könnte, der Ausdruck einer umkehrbar eindeutigen Zuordnung von Energieniveaus E_K (bzw. Eigenräumen $L^{(K)}$) einerseits und irreduziblen Darstellungen $D^{(\ell)}$ der maximalen Symmetriegruppe andrerseits. Erstens können nämlich gewisse irreduzible Darstellungen physikalischen Prinzipien, wie etwa dem Pauli-Prinzip, widersprechen und dürfen deshalb im Hilbertraum des physikalischen Systems nicht auftreten. Zweitens enthält der Hilbertraum im allgemeinen mehrere Multipletts $L^{(K_1)},\dots,L^{(K_r)}$ der maximalen Symmetriegruppe zu verschiedenen Eigenwerten $E_{K_1},\dots,E_{K_r}$ mit der Besonderheit, daß die Multipletts $L^{(K_1)},\dots,L^{(K_r)}$ Darstellungsräume äquivalenter irreduzibler Darstellungen $D^{(K)}$, die wir ja nicht unterscheiden, sind.

Als für Physiker nützliche Eigenschaften der Symmetriegruppen sollte man sich merken: Hat man irgendeine Symmetriegruppe des Hamilton-Operators gefunden und hat man im Hilbertraum des Systems Multipletts

dieser Symmetriegruppe ausgemacht, dann weiß man sofort, daß alle Zustände innerhalb der Multipletts energetisch entartet sind. Ist sogar die maximale Symmetriegruppe bekannt, dann liefert die Zerlegung des Hilbertraums in irreduzible Räume dieser größten Symmetriegruppe automatisch alle verschiedenen Eigenräume $L^{(K)}$ und damit Energieniveaus E_K (wenn man die zufällige Entartung bezüglich der maximalen Symmetriegruppe durch das Postulat der Irreduzibilität ausschließt).

Diese Erkenntnisse erlauben uns zu beurteilen, ob und wie ein entartetes Energieniveau E_0 von H_0 unter dem Einfluß einer Störung H' aufspaltet. Der Betrag der Aufspaltung läßt sich allerdings nie aus Symmetriebetrachtungen, sondern nur aus der besonderen Form von H' herleiten. Die maximale Symmetriegruppe von H_0 sei G, die von H' sei G'. Da die Symmetrien des Gesamt-Hamilton-Operators $H = H_0 + H'$ mit der kleineren der beiden Symmetrien G und G' zusammenfällt, bleibt die Symmetrie des Systems beim Einschalten der Störung H' entweder erhalten (im Falle $G' \supseteq G$), oder aber sie wird vermindert (falls $G' \subset G$). Die Symmetrie eines Systems kann also durch Störungen nie größer werden; sie kann höchstens völlig verändert werden, nämlich dann, wenn G und G' in keiner der drei Relationen $G' \subseteq G$ zueinander stehen.

In der Praxis kommt der Fall $G' \subset G$ am häufigsten vor, d.h. im allgemeinen verringert sich die Symmetrie durch Störungen H'. Wir können jetzt sofort schließen: Das bezüglich H_0 entartete Energieniveau E_0 spaltet beim Einschalten von H' in so viele Niveaus E_i von $H = H_0 + H'$ auf, wie die irreduzible Darstellung $D^{(0)}$ von G irreduzible Bestandteile $D^{(i)}$ von G' hat. Die Dimensionen dieser irreduziblen Darstellungen $D^{(i)}$ von G' geben den Entartungsgrad der Niveaus E_i an. Falls das Multiplett $L^{(0)}$ von G auch bezüglich G' irreduzibel ist, spaltet E_0 nicht auf.

Zum Schluß wollen wir eine Tatsache, die im folgenden Abschnitt benutzt wird, beweisen:
Hat ein physikalisches System H eine kompakte halbeinfache Lie-Gruppe als Symmetriegruppe, dann sind alle Erzeugenden $J_1, \dots, J_p$ und alle

Casimiroperatoren $C_1, \ldots, C_\ell$ mit dem Hamilton-Operator vertauschbar und sind damit Erhaltungsgrößen mit reellen Eigenwerten.

Beweis: Nach Voraussetzung kommutieren alle Gruppenelemente $D(\alpha)$ mit H: $D(\alpha)H = HD(\alpha)$. Wir differenzieren nach α_k und fixieren den Ausdruck an der Stelle $\alpha=0$:

$$\frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_k}\Big|_{\alpha=0} H = H \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_k}\Big|_{\alpha=0}$$

Wegen (I.8) $J_k = -i \frac{\partial D(\alpha)}{\partial \alpha_k}\Big|_{\alpha=0}$ folgt sofort

$$J_k H = H J_k \quad \text{oder} \quad [J_k, H] = 0$$

Die Casimiroperatoren sind Funktionen $C_m(J_1, \ldots, J_p)$ der Erzeugenden und aus diesem Grunde ebenfalls mit dem Hamilton-Cperator vertauschbar:

$$[C_m, H] = 0$$

D. Klassifizierung von Zuständen [3][4][5][8]

Wir stellen zu Beginn dieses Abschnitts die beiden gebräuchlichen Methoden zur Klassifizierung von Wellenfunktionen gegenüber.

a) Diracsche (physikalische) Methode

Nach diesem Verfahren konstruiert man eine vollständige orthogonale Basis des Hilbertraums aus den gemeinsamen Eigenfunktionen irgendeines vollständigen Satzes paarweise miteinander kommutierender Observabler. Die gleichzeitigen Eigenwerte des vollständigen Satzes charakterisieren diese Basiszustände eindeutig. Wichtig sind allerdings nur diejenigen Observablensätze, die den Hamilton-Operator enthalten, weil man sich stets für Zustände mit bestimmter Energie interessiert, und weil nur in diesen "stationären" Zuständen der Erwartungswert jeder dynamischen Größe zeitlich unverändert bleibt. Diese Methode ist dem Physiker geläufig und soll deshalb nicht weiter behandelt werden. Wir werden im folgenden solche Koordinatensysteme des Hilbertraumes als physikalische Basen bezeichnen.

b) Gruppentheoretische (mathematische) Methode

Auch hier wollen wir nur solche Basiszustände wählen und klassifizieren, die gleichzeitig Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind. Es ist dem Verständnis sehr dienlich, wenn man zunächst unterscheidet zwischen der gruppentheoretischen Klassifizierung der Eigenräume $L^{(\kappa)}$ (und damit der Energieniveaus E_κ) des Hamilton-Operators auf der einen Seite und der Klassifizierung einer vollständigen Basis innerhalb der Eigenräume auf der anderen Seite.

Der erste Teil, die gruppentheoretische Klassifikation der Eigenräume, ist schnell erledigt, wenn man sich der Abschnitte I.B. und I.C. erinnert: Die Eigenräume sind Multipletts der maximalen Symmetriegruppe und können daher gekennzeichnet werden durch diejenigen Symbole, mit denen die Gruppentheorie die entsprechenden irreduziblen Darstellungen charakterisiert. Besitzt beispielsweise ein System eine kompakte halbeinfache Lie-Gruppe von Rang 1 als maximale Symmetriegruppe, so bilden nach Racahs Theorem die 1 gleichzeitigen reellen Eigenwerte der 1 Casimiroperatoren den Satz von (mathematischen) Quantenzahlen,

den man den Eigenräumen (bzw. Energieniveaus) zuschreiben kann. Zur eindeutigen Klassifikation der Energieniveaus reichen in unserem Beispiel die Casimiroperatoren nur dann nicht aus, wenn mehrere Eigenräume des Hamilton-Operators äquivalenten Darstellungen der Lie-Gruppe entsprechen.

Nun zum zweiten Teil, der gruppentheoretischen Klassifizierung einer Basis innerhalb eines Eigenraumes des Hamilton-Operators: Im Falle, daß die maximale Symmetriegruppe eine kompakte halbeinfache Lie-Gruppe vom Rang l ist, kann man dazu die l gleichzeitigen reellen Eigenwerte der l paarweise kommutierenden Erzeugenden $H_1, \ldots, H_\ell$ verwenden. Diese Möglichkeit folgt sowohl aus den Theoremen über die Gewichte als auch aus der Vertauschbarkeit der $H_1, \ldots, H_\ell$ mit sämtlichen Casimiroperatoren und dem Hamilton-Operator. Doch im allgemeinen ist die Multiplizität der Gewichte größer als 1, und diese l Quantenzahlen genügen nicht. Die Anzahl der zusätzlich benötigten Operatoren beträgt bei einer p-parametrigen halbeinfachen Lie-Gruppe vom Rang l mindestens $\frac{1}{2}(p-3\ell)$. Es gibt keine Methode, die zwangsläufig auf die zusätzlichen Operatoren führt. Deshalb bedient man sich eines anderen Verfahrens, das nicht auf kompakte halbeinfache Lie-Gruppen beschränkt ist, sondern bei allen Gruppen anwendbar ist, deren reduzible Darstellungen zerfallen. Das Verfahren beruht auf einer im Abschnitt I.C. erläuterten Eigenschaft von Vektorräumen: Ein Darstellungsraum, der bezüglich der Gruppe A irreduzibel invariant ist, bleibt auch gegenüber jeder Untergruppe $B \subset A$ invariant, doch die Irreduzibilität geht im allgemeinen gegenüber B verloren.

Die Klassifizierungsmethode besteht in einer successiven <u>Ausreduktion</u> reduzibler Darstellungen, d.h. in einer fortgesetzten Zerfällung der Eigenräume von H in irreduzible Bestandteile immer kleinerer Untergruppen. A sei die maximale Symmetriegruppe des Hamilton-Operators, deren Multipletts $L^{(a)}$ im Hilbertraum identisch sind mit den Eigenräumen von H. Den Hilbertvektoren innerhalb der Multipletts wird der Satz a mathematischer Quantenzahlen angeheftet, mit dem man die irreduziblen Darstellungen der Gruppe A symbolisiert. Wir wechseln sodann unseren Standpunkt und untersuchen das Verhalten der Räume $L^{(a)}$ bezüglich der Untergruppe $B \subset A$. Bleiben alle $L^{(a)}$ auch gegenüber B irreduzibel, so ist die Gruppe B ungeeignet für unsere Zwecke, und wir probieren andere Untergruppen von A aus. Sind aber die Multipletts $L^{(a)}$ von A bezogen auf

B reduzibel, $L^{(a)} = \sum_b \oplus T_a^b L^{(b)}$, so werden die Zustände in den Multipletts $L^{(b)}$ von B außer mit den Quantenzahlen a mit einem weiteren Satz b von Quantenzahlen versehen, die die betreffende irreduzible Darstellung von B kennzeichnet. Falls B z.B. eine kompakte halbeinfache Lie-Gruppe ist, werden wir zweckmäßig die Eigenwerte ihrer Casimiroperatoren zur Klassifikation ihrer Multipletts $L^{(b)}$ benutzen. Da B nicht die maximale Symmetriegruppe ist, charakterisieren in unserem Beispiel diese Sätze b von Eigenwerten der Casimiroperatoren natürlich nicht die verschiedenen Energieniveaus sondern Zustände mit gleicher Energie. Die Anzahl T_a^b, mit der die irreduziblen Räume $L^{(b)}$ von B im Multiplett von A auftreten, heißt Verzweigungsmultiplizität. Tritt bei der Ausreduktion ein und dieselbe irreduzible Darstellung mehrfach auf ($T_a^b > 1$), ist ein Unterscheidungsmerkmal erforderlich. Wir wiederholen den eben erläuterten Prozeß der Ausreduktion mit einer passenden Untergruppe C von B und setzen das successive Zerfällen der Vektorräume nach irreduziblen Bestandteilen immer kleinerer Untergruppen so lange fort, bis alle Vielfachheiten (bezüglich der gewonnenen Quantenzahlen) verschwunden sind. Wir sind dann bei einzelnen eindeutig gekennzeichneten Zuständen $|(a)b\dots g\rangle$ angelangt, deren Gesamtheit eine vollständige Basis des Hilbertraums darstellt. Je zwei Zustände befinden sich nach Konstruktion in verschiedenen Multipletts wenigstens einer der Symmetriegruppen, so daß die erhaltene Basis bei Verwendung kompakter Gruppen sogar orthogonal ist (siehe Abschnitt I.B.). Waren zur vollständigen Ausreduktion die Gruppen A, B, ..., G nötig, so sagt man: Die Gruppenkette $A \supset B \supset \dots \supset G$ klassifiziert eine vollständige Basis $|(a)b\dots g\rangle$ des Hilbertraumes.

Damit wollen wir die Gegenüberstellung der beiden Klassifizierungsverfahren beenden. Die jeweiligen Vorteile beider Basen liegen auf der Hand: Die nach Dirac klassifizierten Zustände lassen sich physikalisch präparieren, indem man etwa eine maximale Messung des betreffenden vollständigen Observablensatzes macht. Beim Umgang mit mathematisch gekennzeichneten Zuständen kann man andererseits sofort den Apparat und die Resultate der Gruppentheorie einsetzen. In praktischen Fällen kommt es häufig vor, daß beide Methoden teilweise oder völlig identisch sind. Diese Überschneidung tritt ein, wenn die Gruppenkette $A \supset B \supset \dots \supset G$ zum Teil oder ganz auf physikalische Quantenzahlen führt, etwa wenn Casimiroperatoren oder Erzeugende H_i einer der Gruppen A, B,..., G phy-

sikalische Operatoren, d.h. Observable, darstellen. Die Drehgruppe R(3) liefert mit ihrem Casimiroperator J^2 (Gesamtdrehimpuls) und dem infinitesimalen Operator J_z (z-Komponente des Drehimpulses) ein auffallendes Beispiel.

Der Physiker wird bei der Lösung schwieriger Probleme oft so vorgehen müssen: Er berechnet komplizierte Aufgaben in der mathematischen Basis und projiziert die Ergebnisse anschließend auf die physikalische Basis.

Nach diesen zahlreichen aber notwendigen Erläuterungen wollen wir jetzt mit der Anwendung der Gruppentheorie auf unser Kollektivmodell des Kerns beginnen. Der 5-dimensionale isotrope harmonische Oszillator dient bekanntlich als grobes Modell, um Niederenergie-Spektren und Übergangswahrscheinlichkeiten sphärischer Kerne zu erklären. Für feinere Untersuchungen kollektiver Kerneigenschaften können die Zustände des harmonischen Oszillators als Basis verwendet werden, die verhältnismäßig einfach zu handhaben ist.
Wir beginnen mit dem Beweis, daß die unitäre Gruppe U(5) die maximale Symmetriegruppe des Hamilton-Operators ist, die für die Entartung der Oszillatorzustände verantwortlich ist [10]. Die Rotationsinvarianz, die wir bei der Konstruktion des Hamilton-Operstors im Auge haben, indem wir die Variablen zu einem Tensor 0.Stufe bezüglich R(3) koppeln, ist demnach nur ein Teil der gesamten Invarianz. Der Hamilton-Operator lautet in 2.Quantisierung:

$$H = \hbar\omega \left(\sqrt{5}\,[\beta^+ \times \beta]^{[0]} + \tfrac{5}{2}\right) = \hbar\omega \left[\sum_\mu \beta^+_\mu \beta_\mu + \tfrac{5}{2}\right] \quad \text{mit} \tag{I.26}$$

$$[\beta_\mu, \beta_{\mu'}] = [\beta^+_\mu, \beta^+_{\mu'}] = 0$$
$$[\beta_\mu, \beta^+_{\mu'}] = \delta_{\mu\mu'} \tag{I.27}$$

Systematisch eingeführt und begründet werden diese Ausdrücke im Abschnitt I.F. Es sei die allgemeine 5-dimensionale unitäre Transformation $U = (u_{kr})$ gegeben:

$$\sum_{r=1}^{5} u^*_{kr}\, u_{jr} = \delta_{kj} \tag{I.28}$$

Wir transformieren die "Koordinaten" β_μ unitär:

$$\mathcal{B}_\mu = \sum_k U_{\mu k}\beta_k$$
$$\mathcal{B}^+_\mu = \sum_k U^*_{\mu k}\beta^+_k \qquad (I.29)$$

Wir verifizieren, daß die neuen Koordinaten $\mathcal{B}_\mu$ den gleichen Vertauschungsrelationen (I.27) wie die alten Koordinaten β_μ genügen:

$$[\mathcal{B}_\mu, \mathcal{B}_{\mu'}] = \mathcal{B}_\mu\mathcal{B}_{\mu'} - \mathcal{B}_{\mu'}\mathcal{B}_\mu = \sum_{kk'} U_{\mu k}U_{\mu' k'}\underbrace{[\beta_k\beta_{k'} - \beta_{k'}\beta_k]}_{=0} = 0$$

ebenso $\quad [\mathcal{B}^+_\mu, \mathcal{B}^+_{\mu'}] = 0 \qquad$ (I.30)

$$[\mathcal{B}_\mu, \mathcal{B}^+_{\mu'}] = \mathcal{B}_\mu\mathcal{B}^+_{\mu'} - \mathcal{B}^+_{\mu'}\mathcal{B}_\mu = \sum_{kk'} U_{\mu k}U^*_{\mu' k'}\underbrace{[\beta_k\beta^+_{k'} - \beta^+_{k'}\beta_k]}_{=\delta_{kk'}} = \sum_k U_{\mu k}U^*_{\mu' k} = \delta_{\mu\mu'}$$

Es bleibt jetzt nur noch aufzuzeigen, daß der Hamilton-Operator in den neuen Koordinaten die gleiche Gestalt hat: $H(\mathcal{B},\mathcal{B}^+) = H(\beta,\beta^+)$

$$\begin{aligned} H(\mathcal{B},\mathcal{B}^+) &= \hbar\omega\left[\sum_\mu \mathcal{B}^+_\mu\mathcal{B}_\mu + \tfrac{5}{2}\right] = \hbar\omega\left[\sum_\mu\sum_{k\ell} U^*_{\mu k}U_{\mu\ell}\beta^+_k\beta_\ell + \tfrac{5}{2}\right] \\ &= \hbar\omega\left[\sum_{k\ell}\delta_{k\ell}\beta^+_k\beta_\ell + \tfrac{5}{2}\right] = \hbar\omega\left[\sum_k\beta^+_k\beta_k + \tfrac{5}{2}\right] = H(\beta,\beta^+) \end{aligned} \qquad (I.31)$$

Genauere Untersuchungen von Weyl [11] und Baker [10] führten zu dem Resultat: Die Eigenräume des 5-dimensionalen harmonischen Oszillators sind die Darstellungsräume für die vollkommen symmetrischen irreduziblen Darstellungen der U(5), wobei jede dieser Darstellungen genau einmal auftritt. Aus dieser Irreduzibilität können wir schließen, daß U(5) die maximale Symmetriegruppe ist. Die Dimension der vollkommen symmetrischen irreduziblen Darstellungen von U(5), d.h. der Entartungsgrad der Energieniveaus, ist

$$\dim[N] = \binom{4+N}{N} \qquad N = 0,1,2,\ldots \quad \text{Anzahl der Oszillatorquanten (Phononen)} \qquad (I.32)$$

Es sei noch erwähnt, daß die irreduziblen Darstellungen von U(5) stets auch solche von SU(5) sind. Die für bestimmte Fälle zutreffende Besonderheit, daß inäquivalente irreduzible Darstellungen von U(5) äquivalente von SU(5) sind, tritt bei Beschränkung auf vollkommen symmetrische Darstellungen nicht auf. Von jetzt ab werden wir deshalb die

Eigenräume des Hamilton-Operators als Multipletts der halbeinfachen Lie-Gruppe SU(5) auffassen.

Damit ist der weitere Weg zur gruppentheoretischen Klassifikation einer Basis vorgezeichnet: Wir müssen die vollkommen symmetrischen irreduziblen Darstellungen der Gruppe SU(5) fortlaufend in irreduzible Bestandteile immer kleinerer Untergruppen von SU(5) zerlegen, bis wir bei eindimensionalen Darstellungen angelangt sind. Die bei der Ausreduktion auftretenden irreduziblen Darstellungen, ihre Vielfachheit (Verzweigungsmultiplizität) und ihre Dimensionen festzustellen, ist eine der Hauptaufgaben der Darstellungstheorie. Die Mathematiker haben dafür mehrere Verfahren entwickelt, die in dieser Arbeit nicht dargelegt werden können. Besonders verwiesen sei auf einen Preprint von Gruber [9] , in dem Rezepte für die Ermittlung aller drei Multiplizitäten, die wir kennengelernt haben, zusammengestellt sind. Mit Grubers Regeln findet man

die innere Multiplizität	(Multiplizität der Gewichte)
die äußere Multiplizität	(Clebsch-Gordan-Reihe)
die Verzweigungsmultiplizität	(die bei der Ausreduktion auftretende Vielfachheit)

aller kompakten einfachen Lie-Gruppen. Wir machen uns sofort die Ergebnisse der Gruppentheorie zunutze und behandeln zwei verschiedenartige Klassifizierungen der Oszillatorzustände.

(i) Die successive Ausreduktion der vollkommen symmetrischen irreduziblen SU(5)-Darstellungen geschieht nach der Gruppenkette

$$SU(5) \supset R(5) \supset R(3) \qquad (I.33)$$

Wir werden feststellen, daß diese Gruppenkette ausnahmslos auf physikalische Quantenzahlen führt (Seniorität, Drehimpuls und dessen Projektion), daß also die gewonnene Basis identisch ist mit einer physikalischen Basis. Dieser Vorteil wird erkauft durch die Unvollständigkeit der Klassifikation an der Stelle $R(5) \supset R(3)$. Wir werden einen zusätzlichen Index benötigen, der uns die auftretenden Vielfachheiten durchnumeriert.

(ii) Wir konstruieren nach Hecht [12] eine Basis gemäß der Kette

$$SU(5) \supset R(5) \supset R(3) \times R(3) \qquad (I.34)$$

Die Gruppen R(5) und Sp(4) sowie R(3) und SU(2) sind isomorph und haben deshalb Lie-Algebren identischer Struktur. Darum ist folgende Gruppenkette äquivalent zu (I.34):

$$SU(5) \supset Sp(4) \supset SU(2) \times SU(2) \qquad (I.35)$$

Wir werden im weiteren die in der symplektischen Gruppe üblichen Bezeichnungen verwenden, uns also an die Kette (I.35) anlehnen. Der Teil $Sp(4) \supset SU(2) \times SU(2)$ dieser Kette liefert zwar keine physikalischen Quantenzahlen, aber klassifiziert die Sp(4)-Zustände vollständig. Wir erhalten durch (I.35) eine mathematisch natürliche Basis.

Nun die Ergebnisse der Ausreduktion im Detail:

Physikalische Basis gemäß $SU(5) \supset R(5) \supset R(3)$

Eine völlig symmetrische irreduzible SU(5)-Darstellung $D^{[N]}_{SU(5)}$ (gekennzeichnet durch die Anzahl N der Phononen) zerfällt bezüglich R(5), einer nach (I.6) kompakten halbeinfachen Lie-Gruppe vom Rang 2, in folgende irreduzible Bestandteile $D^{(J_m+\Lambda_m, J_m-\Lambda_m)}_{R(5)}$ (symbolisiert durch das höchste Gewicht $\vec{w} = (J_m, \Lambda_m)$):

$$D^{[N]}_{SU(5)} = D^{(N,0)}_{R(5)} \oplus D^{(N-2,0)}_{R(5)} \oplus \ldots \oplus D^{(1,0)}_{R(5)} \text{ oder } D^{(0,0)}_{R(5)} \qquad (I.36)$$

Wir bemerken, daß die Komponenten J_m und Λ_m des höchsten Gewichts für die vollkommen symmetrischen Darstellungen gleich sind und schreiben

$$J_m = \Lambda_m = \frac{1}{2} v \qquad (I.37)$$

v heißt Seniorität und bedeutet physikalisch die Anzahl der Phononen, die nicht paarweise zu 0 gekoppelt sind. Darüber hinaus ist v(v+3) der

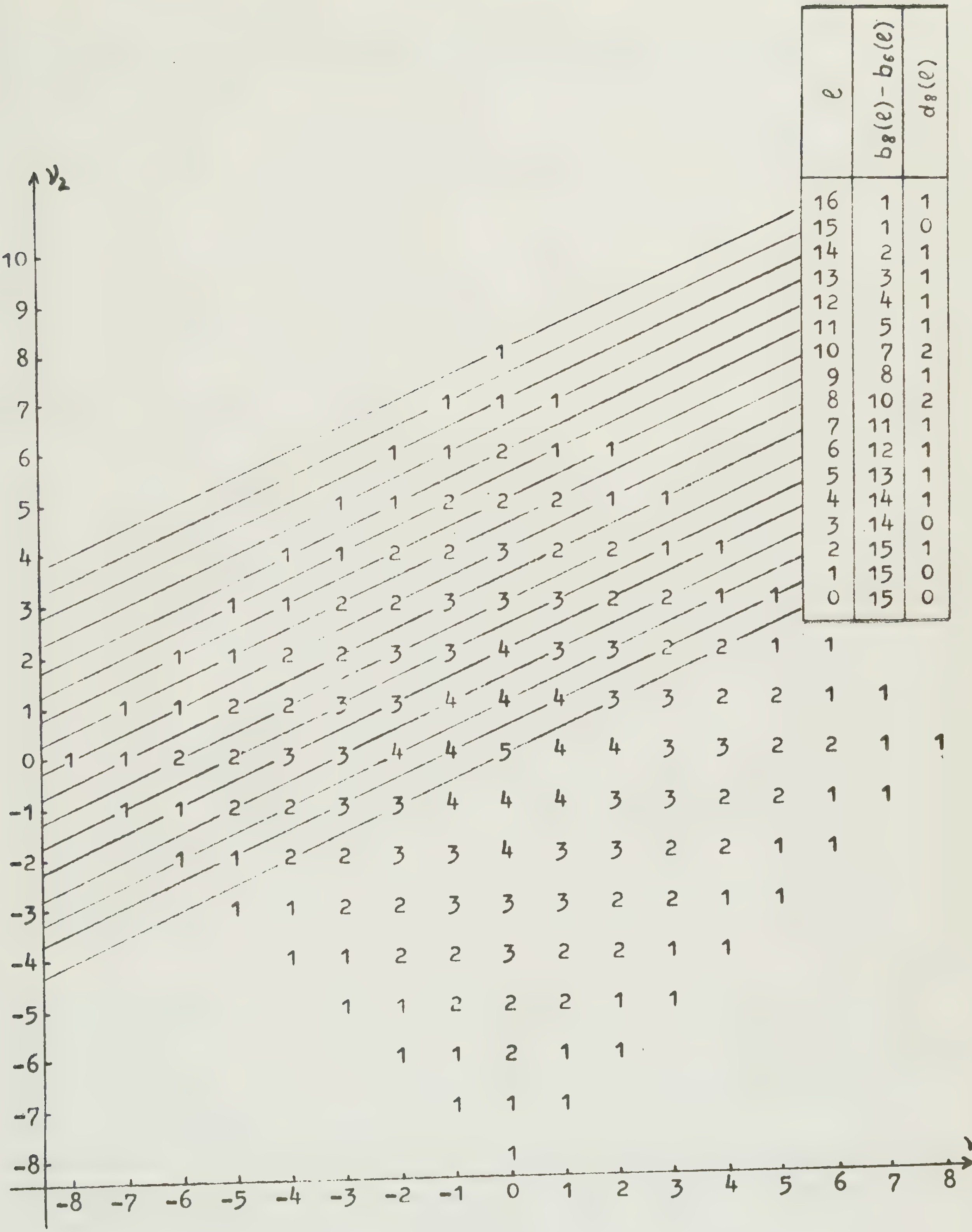
Eigenwert eines der beiden Casimiroperatoren von R(5), des Senioritätsoperators. Die Eigenwerte des zweiten Casimiroperators werden zur Klassifizierung der völlig symmetrischen R(5)-Darstellungen nicht gebraucht, sind also konstant. Die irreduziblen Darstellungen $\mathcal{D}^{(v,0)}_{R(5)}$ von R(5) haben folgende Dimension dim(v):

$$\dim(v) = \frac{1}{6}(v+1)(v+2)(2v+3) \qquad (I.38)$$

Die R(5)-Multipletts sind nach (I.38) mehrdimensional, weshalb die Quantenzahlen N und v für eine vollständige Klassifizierung nicht ausreichen. Die sich anschließende Ausreduktion nach irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe R(3) nennt man Drehimpulsanalyse, weil diese Darstellungen durch die Eigenwerte l des Gesamtdrehimpulses J^2, des Casimiroperators von R(3), charakterisiert werden. Die Drehimpulsanalyse zeigt, daß für $v \geq 6$ Drehimpulsräume mit gleicher Quantenzahl l, also Darstellungsräume äquivalenter irreduzibler Darstellungen von R(3), in ein und demselben Multiplett von R(5) (beschrieben durch die Seniorität v) vorkommen können. Diese mehrfach auftretenden R(3)-Multipletts werden mit Hilfe einer Quantenzahl α, ohne physikalische Bedeutung, durchnumeriert. Racavy [13] gibt eine allgemeine Formel für die Drehimpulsvielfachheiten $d_v(l)$ an:

$$d_v(\ell) = [b_v(\ell) - b_{v-2}(\ell)] - [b_v(\ell+1) - b_{v-2}(\ell+1)] \qquad (I.39)$$

wobei $b_v(\ell)$ die Anzahl der Möglichkeiten ist, mit der v Quadrupol-Phononen die Projektion l auf die z-Achse haben können. Le Tourneux [14] erfand ein graphisches Verfahren zur Bestimmung der Größen $[b_v(\ell) - b_{v-2}(\ell)]$, das hier zwar nicht bewiesen aber trotzdem vorgestellt werden soll: Um den Ausdruck $[b_v(\ell) - b_{v-2}(\ell)]$ zu ermitteln, konstruiert man von außen nach innen das Zahlenschema der Figur I.1 (hier speziell für v=8), dessen Ecken bei (ν_1, ν_2) = (-v,0),(0,v),(v,0) und (0,-v) liegen. Die Summation der Zahlen, die auf der Geraden $\ell = 2\nu_2 - \nu_1$ liegen, liefert gerade die gewünschten Werte $[b_v(\ell) - b_{v-2}(\ell)]$. Eingesetzt in Racavys Formel (I.39) ergibt sich sogleich die Vielfachheit $d_v(l)$. Rekursionsformeln für die $d_v(l)$ wurden von Weber [15] hergeleitet.



l	$b_8(l) - b_6(l)$	$d_8(l)$
16	1	1
15	1	0
14	2	1
13	3	1
12	4	1
11	5	1
10	7	2
9	8	1
8	10	2
7	11	1
6	12	1
5	13	1
4	14	1
3	14	0
2	15	1
1	15	0
0	15	0

Figur I.1

Die nach dieser Methode ermittelten Drehimpulsvielfachheiten $d_v(l)$ bis zur Seniorität v=18 zeigt Tabelle (I.40). Die unterstrichene Zeile bei v=8 ist gerade das Resultat, das man aus Figur I.1 gewinnt.

v \ l	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
0	1																																				
1			1																																		
2			1		1																																
3	1			1	1		1																														
4			1		1	1	1		1																												
5			1		1	1	1	1	1		1																										
6	1			1	1		2	1	1	1	1		1																								
7			1		1	1	1	1	2	1	1	1	1		1																						
8			1		1	1	1	1	2	1	2	1	1	1	1		1																				
9	1			1	1		2	1	1	2	2	1	2	1	1	1	1		1																		
10			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1																
11			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1														
12	1			1	1		2	1	1	2	2	1	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1												
13			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1										
14			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	3	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1								
15	1			1	1		2	1	1	2	2	1	3	2	2	3	3	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1						
16			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	3	2	3	3	3	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1				
17			1		1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	3	2	3	3	3	3	3	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1		
18	1			1	1		2	1	1	2	2	1	3	2	2	3	3	2	4	3	3	3	3	2	3	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1		1

$d_v(l)$ (I.40)

Die Dimension der R(3)-Multipletts mit Drehimpuls l ist bekanntlich

$$\dim(l) = 2l+1 \qquad \text{(I.41)}$$

Die Eigenvektoren des infinitesimalen Operators J_z mit den einfachen Gewichten $m = -l,\dots,+l$ spannen, wie wir wissen, die irreduziblen Darstellungsräume von R(3) vollständig auf. J_z bedeutet physikalisch die Projektion des Gesamtdrehimpulses , die Gewichte m heißen auch magnetische Quantenzahlen. Wir sind bei eindimensionalen Vektorräumen angelangt, womit die Klassifizierung gemäß der Kette $SU(5) \supset R(5) \supset R(3)$ abgeschlossen ist. Die Zustände dieser physikalischen Basis werden im weiteren geschrieben als

$$|[N](v,0)\,l\,\alpha\,m\rangle \quad \text{oder} \quad |[N]\,v\,l\,\alpha\,m\rangle \qquad \text{(I.42)}$$

Mathematische Basis nach Hecht: $SU(5) \supset Sp(4) \supset SU(2) \times SU(2)$

Für die Ausreduktion $SU(5) \supset Sp(4)$ gilt (I.36). Ausgedrückt in der für die symplektische Gruppe üblichen Notierung:

$$D^{[N]}_{SU(5)} = \sum_{J_m = \Lambda_m = \frac{N}{2}, \frac{N}{2}-1, \dots, \frac{1}{2} \text{ oder } 0} \oplus D^{(J_m, \Lambda_m)}_{Sp(4)} \qquad \text{(I.43)}$$

wobei J_m, Λ_m wieder die beiden Komponenten des höchsten Gewichts der Darstellung sind.

Bevor wir die Ausreduktion fortführen, eine neue Definition: Seien $A = \{a_0, a_1, \dots, a_i, \dots\}$ und $B = \{b_0, b_1, \dots, b_k, \dots\}$ zwei Gruppen linearer Transformationen, wobei alle Elemente A mit allen Elementen aus B vertauschbar sein sollen. Alle möglichen Kombinationen $a_i b_k$ bilden dann die Elemente einer neuen Gruppe, des sogenannten direkten Produkts $A \times B$. Speziell für halbeinfache Lie-Gruppen gilt: Die Erzeugenden der einzelnen Gruppen zusammengenommen ergeben die Erzeugenden der Produktgruppe; der Rang des Produkts ist gleich der Summe der Ränge der Faktoren; die Gesamtheit der Casimiroperatoren beider Einzelgruppen stellt den vollständigen Satz der Casimiroperatoren für das direkte Produkt dar. Schließlich noch: Das Kronecker-Produkt $L^{(a)} \otimes L^{(b)}$ zweier Multipletts von A und B ist ein Multiplett des direkten Produkts $A \times B$.

Die Untergruppe $SU(2) \times SU(2)$ (bzw. $R(3) \times R(3)$) ist demnach vom Rang 2 und hat 6 Erzeugende, nämlich die Komponenten zweier kommutierender Drehimpulsoperatoren J und Λ. In Standardform haben wir also die 6 infinitesimalen Operatoren J_0, J_+, J_- und $\Lambda_0, \Lambda_+, \Lambda_-$ mit den bekannten Vertauschungsrelationen:

$$\begin{gathered} [J_0, J_\pm] = \pm J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2 J_0 \\ [\Lambda_0, \Lambda_\pm] = \pm \Lambda_\pm \quad , \quad [\Lambda_+, \Lambda_-] = 2 \Lambda_0 \\ [J_i, \Lambda_k] = 0 \quad \text{für alle } i,k \end{gathered} \qquad \text{(I.44)}$$

Die irreduziblen Darstellungen von SU(2)×SU(2) werden wir mit den Eigenwerten J und Λ ihrer beiden Casimiroperatoren J^2 und Λ^2 kennzeichnen: $D^{(J,\Lambda)}_{SU(2)\times SU(2)}$. Bei der Ausreduktion der in unserem Falle auftretenden völlig symmetrischen Sp(4)-Darstellungen, $J_m = \Lambda_m$, sind J und Λ ebenfalls gleich und nehmen die Werte $J = \Lambda = J_m, J_m - \frac{1}{2}, \ldots, 0$ an:

$$D^{(J_m,\Lambda_m)}_{Sp(4)} = D^{(J_m,\Lambda_m)}_{SU(2)\times SU(2)} \oplus D^{(J_m-\frac{1}{2},\Lambda_m-\frac{1}{2})}_{SU(2)\times SU(2)} \oplus \ldots \oplus D^{(0,0)}_{SU(2)\times SU(2)}, \text{ wobei } J_m = \Lambda_m \tag{I.45}$$

Die Dimension einer Darstellung $D^{(J,\Lambda)}_{SU(2)\times SU(2)}$ folgt ganz einfach aus den Dimensionen $(2J+1)$ bzw. $(2\Lambda+1)$ der Darstellungen der einzelnen Drehgruppen:

$$\dim(J,\Lambda) = (2J+1)(2\Lambda+1) \tag{I.46}$$

In unserem Falle sind die Dimensionen also $(2J+1)^2 = (2\Lambda+1)^2$.

Die Eigenfunktionen der beiden vertauschbaren infinitesimalen Operatoren J_0 und Λ_0 zu den Eigenwerten $M_J = -J, \ldots, +J$ und $M_\Lambda = -\Lambda, \ldots, +\Lambda$ bilden eine vollständig klassifizierte Basis der SU(2)×SU(2)-Multipletts; denn die Gewichte $\vec{w} = (M_J, M_\Lambda)$ sind einfach.
Damit ist auch das Klassifizierungsproblem in der Hechtschen Basis gelöst, und wir schreiben die Zustände dieser mathematischen Basis als

$$|[N](J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda\rangle \quad \text{mit} \quad J_m = \Lambda_m, J = \Lambda \tag{I.47}$$

Figur I.2 zeigt die physikalisch und mathematisch klassifizierten Oszillatorzustände bis N=6 Phononen.

	v	ℓ	α	m	$J_m = \Lambda_m$	$J = \Lambda$	M_J	M_Λ
N=4	4	8	0		2	2		
	4	6	0		2	3/2		
	4	5	0		2	1		
	4	4	0		2	1/2		
	4	2	0		2	0		
	2	4	0		1	1		
	2	2	0		1	1/2		
	0	0	0		1	0		
					0	0		
N=3	3	6	0		3/2	3/2		
	3	4	0		3/2	1		
	3	3	0		3/2	1/2		
	3	0	0		3/2	0		
	1	2	0		1/2	1/2		
					1/2	0		
N=2	2	4	0	$-\ell,\dots,+\ell$	1	1	$-J,\dots,+J$	$-\Lambda,\dots,+\Lambda$
	2	2	0		1	1/2		
	0	0	0		1	0		
					0	0		
N=1	1	2	0		1/2	1/2		
					1/2	0		
N=0	0	0	0		0	0		

Figur I.2 (Anfang)

	v	l	α	m	$J_m = \Lambda_m$	$J = \Lambda$	M_J	M_Λ
	6	12	0					
	6	10	0		3	3		
	6	9	0		3	5/2		
	6	8	0		3	2		
	6	7	0		3	3/2		
	6	6	0		3	1		
	6	6	1		3	1/2		
N=6	6	4	0		3	0		
	6	3	0		2	2		
	6	0	0		2	3/2		
	4	8	0		2	1		
	4	6	0		2	1/2		
	4	5	0		2	0		
	4	4	0	$-\ell,\ldots,+\ell$	1	1	$-J,\ldots,+J$	$-\Lambda,\ldots,+\Lambda$
	4	2	0		1	1/2		
	2	4	0		1	0		
	2	2	0		0	0		
	0	0	0					
	5	10	0		5/2	5/2		
	5	8	0		5/2	2		
	5	7	0		5/2	3/2		
	5	6	0		5/2	1		
	5	5	0		5/2	1/2		
N=5	5	4	0		5/2	0		
	5	2	0		3/2	3/2		
	3	6	0		3/2	1		
	3	4	0		3/2	1/2		
	3	3	0		3/2	0		
	3	0	0		1/2	1/2		
	1	2	0		1/2	0		

Figur I.2 (Ende)

E. Coefficients of fractional parentage für Spin 2 - Systeme [5][12]

Der Hamilton-Operator (I.26) des harmonischen Oszillators legt die Interpretation als System identischer Spin 2-Teilchen, die sich alle im Energieniveau $\hbar\omega$ aufhalten, nahe. Die notwendige Symmetrisierung der Wellenfunktionen ist in der Besetzungszahl-Darstellung $|[N]v\ell\alpha m\rangle$ automatisch gewährleistet. Unabhängig von unserem Fall gibt es für alle Systeme identischer Teilchen, die sich im gleichen Energieniveau mit dem Spin j befinden, ein Verfahren zur Symmetrisierung bzw. Antisymmetrisierung der Vielteilchen-Wellenfunktionen mit bestimmtem Gesamtdrehimpuls. Sei $|j^{(k-1)}\alpha' J' M'\rangle$ die vollkommen (anti)symmetrisierte Wellenfunktion von (k-1) dieser Teilchen. α' ist das Symbol für alle weiteren zur eindeutigen Klassifizierung benötigten Quantenzahlen. An den genannten Zustand wird das k.Teilchen vektoriell zum Gesamtdrehimpuls J gekoppelt:

$$|j^{(k-1)}\alpha' J', j; JM\rangle = \sum_{M'm} \langle J'M', jm | JM\rangle \, |j^{(k-1)}\alpha' J' M'\rangle |jm\rangle \qquad (I.48)$$

Die Wellenfunktion (I.48) ist keineswegs (anti)symmetrisch in allen k Teilchen; doch die für alle möglichen Zwischendrehimpulse J' und alle zusätzlichen Quantenzahlen α' sich ergebende Gesamtheit dieser Funktionen (I.48) bildet eine Basis für den Teilraum von k Teilchen mit Gesamtdrehimpuls J. Also können wir auch die total (anti)symmetrische k-Teilchenfunktion $|j^{(k)}\alpha JM\rangle$ mit dem Drehimpuls J nach den Funktionen (I.48) entwickeln:

$$|j^{(k)}\alpha JM\rangle = \sum_{\alpha' J'} \langle j^{k-1}\alpha' J'; j | \} j^{k}\alpha J\rangle \, |j^{(k-1)}\alpha' J', j; JM\rangle \qquad (I.49)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $\langle j^{k-1}\alpha' J'; j|\}j^{k}\alpha J\rangle$ oder kurz $\langle j^{k-1}; j|\}j^{k}\rangle$ heißen <u>coefficients of fractional parentage</u> (cfp). Bei Kenntnis aller cfp kann man demnach schrittweise, mit Zweiteilchen-Funktionen beginnend, (anti)symmetrisierte Wellenfunktionen beliebig vieler Teilchen zu vorgegebenem Gesamtdrehimpuls konstruieren.

Nach diesem physikalischen Zugang zu den cfp wollen wir nun den Zusammenhang mit der Gruppentheorie herstellen. Wir setzen zunächst (I.48) in (I.49) ein:

$$|j^{(k)}\alpha J M\rangle = \sum_{\alpha' J'} \sum_{M' m} \langle j^{k-1}\alpha' J'; j | \} j^k \alpha J\rangle \langle J'M', jm | JM\rangle \, |j^{(k-1)}\alpha' J' M'\rangle |jm\rangle \tag{I.50}$$

Da sich die k identischen Teilchen nach Voraussetzung sämtlich im gleichen Energieniveau aufhalten, sind alle k-Teilchen-Wellenfunktionen $|j^{(k)}\alpha J M\rangle$, k fest, energetisch entartet. Wie wir aus Abschnitt I.C. wissen, bilden sie deshalb eine Basis für eine (anti)symmetrische irreduzible Darstellung $D_A^{(k)}$ der maximalen Symmetriegruppe A. Die Wellenfunktionen $|j^{(k-1)}\alpha' J' M'\rangle |jm\rangle$ auf der rechten Seite von (I.50), die nicht (anti)symmetrisch in allen k Teilchen sind, stellen eine Basis dar für das reduzible Kronecker-Produkt $D_A^{(k-1)} \otimes D_A^{(1)}$ der völlig (anti) symmetrischen irreduziblen Darstellungen $D_A^{(k-1)}$ und $D_A^{(1)}$. Ein Vergleich von (I.50) mit der Definition (I.12) der Wigner-Koeffizienten ergibt sofort:

$$\langle j^{(k-1)}\alpha' J' M'; j^{(1)} m | j^{(k)}\alpha J M\rangle = \langle j^{k-1}\alpha' J'; j | \} j^k \alpha J\rangle \langle J'M', jm | JM\rangle \tag{I.51}$$

wobei $\langle j^{(k-1)}\alpha' J' M'; j^{(1)} m | j^{(k)}\alpha J M\rangle$ die Wigner-Koeffizienten der maximalen Symmetriegruppe A sind, die zu folgendem Kronecker-Produkt gehören:

$$D_A^{(k-1)} \otimes D_A^{(1)} = D_A^{(k)} \oplus \ldots \tag{I.52}$$

Die cfp sind demnach bis auf einen gewöhnlichen Clebsch-Gordan-Koeffizienten, der die gesamte M-Abhängigkeit enthält, besonderen Wigner-Koeffizienten der maximalen Symmetriegruppe gleich, und zwar sind die betreffenden Wigner-Koeffizienten durch zwei Eigenarten charakterisiert:

1. Sie transformieren die "ungekoppelte" Basis $|j^{(k-1)}\alpha' J'M'\rangle|jm\rangle$ des speziellen Kronecker-Produkts $D_A^{(k-1)} \otimes D_A^{(1)}$ in die Basis $|j^{(k)}\alpha JM\rangle$ der irreduziblen Darstellungen $D_A^{(k)}$.

2. Als Basen der vorkommenden irreduziblen Darstellungen sind Funktionen mit bestimmtem Gesamtdrehimpuls gewählt, oder gruppentheoretisch gesprochen: Die die Basen klassifizierende Gruppenkette $A \supset B \supset \ldots \supset G$ enthält R(3).

Die Bestimmung der cfp ist damit zurückgeführt auf die Berechnung von Wigner-Koeffizienten. Racah [16] bewies ein Theorem, das uns sehr erleichtert, die Wigner-Koeffizienten zu finden.
Seien $\langle (a_1)b_1\tau_{b_1}c_1 \ldots g_1, (a_2)b_2\tau_{b_2}c_2 \ldots g_2|(a\tau_a)b\tau_b c \ldots g\rangle$ die Wigner-Koeffizienten einer Gruppe A zum Kronecker-Produkt $D^{(a_1)} \otimes D^{(a_2)} = \sum_a \oplus \Gamma^a_{a_1 a_2} D^{(a)}$ wobei die Basen der Multipletts durch die Gruppenkette $A \subset B \subset C \quad \ldots \subset G$ klassifiziert sind. Der Index τ unterscheidet hier wieder äquivalente irreduzible Darstellungen. Nach Racah zerfallen diese Wigner-Koeffizienten in zwei Faktoren, wobei der eine Faktor ein Wigner-Koeffizient der Untergruppe B zum Kronecker-Produkt $D^{(b_1)} \otimes D^{(b_2)} = \Gamma^b_{b_1 b_2} D^{(b)} \oplus \ldots$ ist und der andere ein Doppelstrich-Wigner-Koeffizient von A, der nur von den Quantenzahlen der irreduziblen Darstellungen von A und B abhängt, also von den Größen $c_1, \ldots, g_1, c_2, \ldots, g_2, c, \ldots, g$ unabhängig ist:

$$\langle (a_1)b_1\tau_{b_1}c_1 \ldots g_1, (a_2)b_2\tau_{b_2}c_2 \ldots g_2|(a\tau_a)b\tau_b c \ldots g\rangle = \tag{I.53}$$

$$\langle (b_1)c_1 \ldots g_1, (b_2)c_2 \ldots g_2|(b\tau_b)c \ldots g\rangle \langle (a_1)b_1\tau_{b_1}, (a_2)b_2\tau_{b_2}\|(a\tau_a)b\tau_b\rangle$$

Wir gehen jetzt an die Bestimmung der cfp für Spin 2-Bosonen, die uns, wie sich erweisen wird, als unentbehrliches Werkzeug bei der Untersuchung von Kollektiveigenschaften der Atomkerne dienen. In der physikalischen Basis lauten sie $\langle Nv'\ell'\alpha', 1120|\}N+1, v\ell\alpha\rangle$ und hängen mit den Wigner-Koeffizienten der maximalen Symmetriegruppe SU(5) zum Kronecker-Produkt $D^{[N]}_{SU(5)} \otimes D^{[1]}_{SU(5)} = D^{[N+1]}_{SU(5)} \oplus \ldots$ (Γ^{N+1}_{N1} ist hier gleich 1) gemäß (I.51) zusammen:

$$\langle [N]v'\ell'\alpha' m'; [1]120(m-m')|[N+1]v\ell\alpha m\rangle = \tag{I.54}$$

$$\langle Nv'\ell'\alpha', 1120|\}N+1, v\ell\alpha\rangle \langle \ell' m', 2(m-m')|\ell m\rangle$$

Nach (I.53) spaltet der SU(5)-Wigner-Koeffizient auf in einen R(5)- bzw. Sp(4)-Wigner-Koeffizienten und einen SU(5)-Doppelstrich-Wigner-Koeffizienten:

$$\langle [N] v' \ell' \alpha' m' ; [1] 1 2 0 (m-m') | [N+1] v \ell \alpha m \rangle = \qquad \text{(I.55)}$$
$$\langle (v') \ell' \alpha' m' ; (1) 2 0 (m-m') | (v) \ell \alpha m \rangle \langle [N] v' ; [1] 1 \| [N+1] v \rangle$$

Hier tritt der angekündigte Fall ein: Um die R(5)-Wigner-Koeffizienten mit gruppentheoretischen Methoden berechnen zu können, müssen wir zur mathematisch natürlichen Basis ($Sp(4) \supset SU(2) \times SU(2)$) übergehen. Wie man die Wigner-Koeffizienten $\langle (J_{m_1} \Lambda_{m_1}) J_1 \Lambda_1 M_{J_1} M_{\Lambda_1} ; (J_{m_2} \Lambda_{m_2}) J_2 \Lambda_2 M_{J_2} M_{\Lambda_2} | (J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda \rangle$ in dieser Basis bestimmt und wie man anschließend auf die physikalische Basis ($R(5) \supset R(3)$) transformiert, kann hier nur angedeutet werden. Obwohl wir uns nur für R(5)-Wigner-Koeffizienten mit

$$J_{m_1} = \Lambda_{m_1} = \tfrac{1}{2} v' , \; J_{m_2} = \Lambda_{m_2} = \tfrac{1}{2} , \; J_m = \Lambda_m = \tfrac{1}{2} v \quad \text{und} \quad J_1 = \Lambda_1 , \; J_2 = \Lambda_2 , \; J = \Lambda$$

interessieren, sei hier das allgemeine Verfahren angegeben. Die einzelnen Schritte sind:

i. Das Standard-Koordinatensystem der Lie-Algebra C_2 von Sp(4) wird aufgestellt. Die 10 Erzeugenden sind

$$\begin{array}{lll} H_1 \; (= J_0) & H_2 \; (= \Lambda_0) & F_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \\ F_{10} \; (= J_+) & F_{01} \; (= \Lambda_+) & F_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ F_{-10} \; (= J_-) & F_{0-1} \; (= \Lambda_-) & F_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \\ & & F_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \end{array} \qquad \text{(I.56)}$$

H_1 und H_2 sind die beiden vertauschbaren infinitesimalen Operatoren. Die Indizes α_1, α_2 der Stufenoperatoren $F_{\alpha_1 \alpha_2}$ sind die Komponenten der zugehörigen Wurzel $\vec{W} = (\alpha_1, \alpha_2)$, die durch die Struktur der Algebra von vornherein festgelegt sind. Sechs der Erzeugenden von Sp(4) spannen die Lie-Algebra der Untergruppe SU(2)×SU(2) auf. Die für die

Untergruppe üblichen Bezeichnungen sind in Klammern gesetzt. Diese 6 infinitesimalen Operatoren sind uns schon früher (siehe (I.44)) begegnet und sind die Standardkomponenten zweier vertauschbarer Drehimpulsoperatoren $\vec{J}$ und $\vec{\Lambda}$.

ii. Der allgemeine Zustand $|(J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda\rangle$ der mathematischen Basis einer irreduziblen Darstellung $D^{(J_m \Lambda_m)}_{Sp(4)}$ von Sp(4) wird mit Hilfe der Stufenoperatoren (Technik von Racah) aus dem Zustand $|(J_m \Lambda_m) J_m \Lambda_m J_m \Lambda_m\rangle$ des höchsten Gewichts konstruiert. Man führt zwei Operatoren ein:

$$
\begin{aligned}
O_{-+} &= (\sqrt{2}\, F_{10} F_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}) + (\sqrt{2}\, F_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}})(2H_1+1) \\
O_{--} &= (F_{0-1}\, O_{-+}) + [(\sqrt{2}\, F_{-10} F_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}) - (\sqrt{2}\, F_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}})(2H_1+1)](2H_2+1)
\end{aligned}
\tag{I.57}
$$

Mit diesen Operatoren kann man alle Zustände mit $M_J = J$ und $M_\Lambda = \Lambda$ durch successive Anwendung auf den Zustand höchsten Gewichts erzeugen. O_{-+} wirkt, auf einen Zustand mit $M_J = J$ und $M_\Lambda = \Lambda$ angewendet, als J-Erniedrigungs- und Λ-Erhöhungsoperator in Schritten von $\frac{1}{2}$ und O_{--} als J-Erniedrigungs- und Λ-Erniedrigungsoperator, wieder in $\frac{1}{2}$-Schritten. Die Erniedrigungsoperatoren J_- und Λ_- liefern uns anschließend in wohlbekannter Weise alle möglichen M_J- und M_Λ-Werte und damit den vollständigen Satz von mathematischen Basisfunktionen für die irreduzible Darstellung $D^{(J_m, \Lambda_m)}_{Sp(4)}$. Bezeichnet man mit M den erforderlichen Normierungsfaktor, dann bekommt man den allgemeinen Zustand aus dem des höchsten Gewichts folgendermaßen:

$$
|(J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda\rangle = M\, J_-^{(J-M_J)} \Lambda_-^{(\Lambda-M_\Lambda)} O_{--}^{(J_m+\Lambda_m-J-1)} O_{-+}^{(J_m-\Lambda_m-J+\Lambda)} |(J_m \Lambda_m) J_m \Lambda_m J_m \Lambda_m\rangle
\tag{I.58}
$$

iii. Da durch (I.58) der allgemeine Zustand explizit durch die infinitesimalen Operatoren ausgedrückt ist, erhalten wir bei Benutzung der Vertauschungsrelationen, die für das Standard-Koordinantensystem bekannt sind (I.5), sofort die Matrixelemente der Erzeugenden in der mathematischen Basis.

iv. Zu Rekursionsformeln für die R(5)-Wigner-Koeffizienten gelangt man schließlich, indem man analog zum Verfahren bei R(3) auf die Wellenfunktion des gekoppelten Systems

$$|(J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda\rangle = \sum_{J_1 \Lambda_1 J_2 \Lambda_2} \sum_{M_{J_1} M_{\Lambda_1} M_{J_2} M_{\Lambda_2}} \langle (J_{m_1} \Lambda_{m_1}) J_1 \Lambda_1 M_{J_1} M_{\Lambda_1}; (J_{m_2} \Lambda_{m_2}) J_2 \Lambda_2 M_{J_2} M_{\Lambda_2} | (J_m \Lambda_m) J \Lambda M_J M_\Lambda\rangle$$

$$|(J_{m_1} \Lambda_{m_1}) J_1 \Lambda_1 M_{J_1} M_{\Lambda_1}\rangle |(J_{m_2} \Lambda_{m_2}) J_2 \Lambda_2 M_{J_2} M_{\Lambda_2}\rangle \quad (I.59)$$

Stufenoperatoren $F_{\alpha_1\alpha_2} = F_{\alpha_1\alpha_2}(1) + F_{\alpha_1\alpha_2}(2)$, $\alpha_1, \alpha_2 = \pm\frac{1}{2}$, anwendet, wobei $F_{\alpha_1\alpha_2}(1)$ und $F_{\alpha_1\alpha_2}(2)$ jeweils nur auf die Funktionen des Systems 1 bzw. 2 wirken. Rekursionsformeln für gewöhnliche Clebsch-Gordan-Koeffizienten entstehen bekanntlich in ähnlicher Weise, wenn man die Operatoren $J_+ = j_{1+} + j_{2+}$ und $J_- = j_{1-} + j_{2-}$ auf beide Seiten der Gleichung

$$|J M\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | J M\rangle \; |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

wirken läßt.

Die in den Rekursionsformeln auftauchenden Matrixelemente der infinitesimalen Operatoren von Sp(4) wurden in Schritt iii. bestimmt. Explizit angegeben seien jetzt die für uns in Frage kommenden von Hecht berechneten R(5)-Wigner-Koeffizienten:

$$\langle (\tfrac{1}{2}v\, \tfrac{1}{2}v) J+\tfrac{1}{2}\; J+\tfrac{1}{2}\; M_{J'} M_{\Lambda'}; (\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\, m_j m_\lambda | (\tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}) J J M_J M_\Lambda\rangle =$$

$$- \langle J+\tfrac{1}{2}\, M_{J'}, \tfrac{1}{2}\, m_j | J M_J\rangle \langle J+\tfrac{1}{2}\, M_{\Lambda'}, \tfrac{1}{2}\, m_\lambda | J M_\Lambda\rangle \sqrt{\frac{(v-2J)(v-2J+1)(2J+2)}{2(2J+1)(v+1)(2v+3)}}$$

$$\langle (\tfrac{1}{2}v\, \tfrac{1}{2}v) J-\tfrac{1}{2}\; J-\tfrac{1}{2}\; M_{J'} M_{\Lambda'}; (\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\, m_j m_\lambda | (\tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}) J J M_J M_\Lambda\rangle = \quad (I.60)$$

$$\langle J-\tfrac{1}{2}\, M_{J'}, \tfrac{1}{2}\, m_j | J M_J\rangle \langle J-\tfrac{1}{2}\, M_{\Lambda'}, \tfrac{1}{2}\, m_\lambda | J M_\Lambda\rangle \sqrt{\frac{J(v+2J+2)(v+2J+3)}{(2J+1)(v+1)(2v+3)}}$$

$$\langle (\tfrac{1}{2}v\, \tfrac{1}{2}v) J\; J\; M_J M_\Lambda; (\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) 0\,0\,0\,0 | (\tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}v+\tfrac{1}{2}) J J M_J M_\Lambda\rangle =$$

$$\langle J\; M_J, 0\,0 | J M_J\rangle \langle J M_\Lambda, 0\,0 | J M_\Lambda\rangle \sqrt{\frac{(v+2J+1)(v+2J+3)}{(v+1)(2v+3)}}$$

Hecht hat die stets willkürliche Wahl der Phasen so getroffen, daß die R(5)-Wigner-Koeffizienten (I.60) reell werden. Die in (I.55) erscheinenden SU(5)-Doppelstrich-Wigner-Koeffizienten können durch Rekursionstechniken, die den eben für die R(5)-Wigner-Koeffizienten beschriebenen ähnlich sind, ausgerechnet werden. Die einzigen, die für total symmetrische Darstellungen nicht verschwinden, sind:

$$\begin{aligned} \langle [N]v, [1]1 \,\|\, [N+1]\, v+1 \rangle &= \sqrt{\frac{(N+v+5)(v+1)}{(2v+5)(N+1)}} \\ \langle [N]v, [1]1 \,\|\, [N+1]\, v-1 \rangle &= \sqrt{\frac{(N-v+2)(v+2)}{(2v+1)(N+1)}} \end{aligned} \qquad (I.61)$$

v. Das einzige, was noch zu tun bleibt, um die cfp mit den Gleichungen (I.54) und (I.55) endgültig zu bestimmen, ist die unitäre Transformation der R(5)-Wigner-Koeffizienten (I.60) von der mathematischen auf die physikalische Basis:

$$\begin{aligned} &\langle (v')\ell'\alpha' m' ; (1)2\,0\,(m-m') \,|\, (v)\ell\alpha m \rangle = \\ &\sum_{J=\Lambda, M_J, M_\Lambda} \sum_{J'=\Lambda', M_{J'}, M_{\Lambda'}} \langle v'\ell'\alpha' m' | J'\Lambda' M_{J'} M_{\Lambda'} \rangle \langle J\Lambda M_J M_\Lambda | v\ell\alpha m \rangle \cdot \\ &\qquad \langle (\tfrac{1}{2}v' \tfrac{1}{2}v') J'\Lambda' M_{J'} M_{\Lambda'} ; (\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}) j \lambda m_j m_\lambda \,|\, (\tfrac{1}{2}v \tfrac{1}{2}v) J\Lambda M_J M_\Lambda \rangle \end{aligned} \qquad (I.62)$$

mit

$$|(v)\ell\alpha m\rangle = \sum_{J=\Lambda, M_J, M_\Lambda} \langle J\Lambda M_J M_\Lambda | v\ell\alpha m \rangle \, |(\tfrac{1}{2}v \tfrac{1}{2}v) J\Lambda M_J M_\Lambda \rangle \qquad (I.63)$$

Die Komponenten I_0, I_+, I_- des physikalischen Drehimpulses hängen mit den infinitesimalen Operatoren des Standard-Koordinatensystems (I.56) von Sp(4) folgendermaßen zusammen:

$$\begin{aligned} I_0 &= 3J_0 + \Lambda_0 \\ I_\pm &= 2\Lambda_\pm + \sqrt{6}\, F_{\pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}} \end{aligned} \qquad (I.64)$$

Außer $\mathcal{J}=\Lambda$ gilt deshalb in den Gleichungen (I.62) und (I.63) immer auch

$$m = 3M_{\mathcal{J}} + M_{\Lambda} \tag{I.65}$$

Zur Bestimmung der von m unabhängigen cfp reichen die Zustände mit m=1 aus. Die für den Übergang (I.62) zur physikalischen Basis benötigten Transformations-Koeffizienten

$$\langle \mathcal{J}\mathcal{J} M_{\mathcal{J}} M_{\Lambda} | v \ell \alpha \ell \rangle = \langle \mathcal{J}\mathcal{J} M_{\mathcal{J}} (\ell - 3M_{\mathcal{J}}) | v \ell \alpha \ell \rangle$$

erhält man aus der Relation

$$I_{+} \, | v \ell \alpha \ell \rangle = 0 \tag{I.66}$$

Der Erhöhungsoperator auf den Zustand höchsten Gewichts angewandt, ergibt 0.
Setzt man nämlich nun (I.63) und (I.64) in (I.66) ein und multipliziert anschließend von links mit $\langle (\tfrac{1}{2}v \, \tfrac{1}{2}v) \mathcal{J}\mathcal{J} M_{\mathcal{J}} (I - 3M_{\mathcal{J}} + 1)|$, so entsteht ein lineares Gleichungssystem für die Transformations-Koeffizienten:

$$\begin{aligned} 0 = {} & 2\sqrt{(\mathcal{J} - \ell + 3M_{\mathcal{J}})(\mathcal{J} + \ell - 3M_{\mathcal{J}} + 1)} \, \langle \mathcal{J}\mathcal{J} M_{\mathcal{J}} (\ell - 3M_{\mathcal{J}}) | v \ell \alpha \ell \rangle + \\ & \sqrt{\frac{3(v-2\mathcal{J})(v+2\mathcal{J}+3)(\mathcal{J}+M_{\mathcal{J}}+1)(\mathcal{J}+\ell+2)}{(2\mathcal{J}+1)(2\mathcal{J}+2)}} \, \langle (\mathcal{J}+\tfrac{1}{2})(\mathcal{J}+\tfrac{1}{2})(M_{\mathcal{J}}-\tfrac{1}{2})(\ell-3M_{\mathcal{J}}+\tfrac{3}{2}) | v \ell \alpha \ell \rangle + \\ & \sqrt{\frac{3(v-2\mathcal{J}+1)(v+2\mathcal{J}+2)(\mathcal{J}+M_{\mathcal{J}})(\mathcal{J}-\ell+3M_{\mathcal{J}}-1)}{2\mathcal{J}(2\mathcal{J}+1)}} \, \langle (\mathcal{J}-\tfrac{1}{2})(\mathcal{J}-\tfrac{1}{2})(M_{\mathcal{J}}-\tfrac{1}{2})(\ell-3M_{\mathcal{J}}+\tfrac{3}{2}) | v \ell \alpha \ell \rangle \end{aligned} \tag{I.67}$$

Soweit Hecht. Dieses Gleichungssystem mußten wir für jede Seniorität v und jeden Drehimpuls l neu aufstellen und lösen. Die verschiedenen Zeilen des Systems (I.67) resultieren daraus, daß man für $\mathcal{J}$ und $M_{\mathcal{J}}$ alle erlaubten Zahlen einsetzt. Die Auflösung von (I.67) liefert dann

alle möglichen Koeffizienten $\langle \mathcal{J}\mathcal{J}M_{\mathcal{J}}(\ell-3M_{\mathcal{J}})/v\ell\alpha\ell\rangle = \langle v\ell\alpha\ell|\mathcal{J}\mathcal{J}M_{\mathcal{J}}(\ell-3M_{\mathcal{J}})\rangle$ mit festem v und l. Wie wir bei der Klassifizierung der mathematischen Basis ausgeführt haben, kommen folgende $\mathcal{J}$- und $M_{\mathcal{J}}$-Werte vor:

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \tfrac{1}{2}v,\ \tfrac{1}{2}v-\tfrac{1}{2},\ldots,0 \\ M_{\mathcal{J}} &= \mathcal{J},\mathcal{J}-1,\ldots,-\mathcal{J} \end{aligned} \qquad (I.68)$$

Wegen $M_\Lambda = \ell-3M_{\mathcal{J}}$ (I.65) und $\Lambda = \mathcal{J}$ verschwinden aber nur solche Transformations-Koeffizienten nicht, für die die $(\mathcal{J},M_{\mathcal{J}})$-Paare zusätzlich folgender Beziehung gehorchen:

$$-\mathcal{J} \leq (\ell-3M_{\mathcal{J}}) \leq +\mathcal{J} \qquad (I.69)$$

Beispiel: v=5, l=2; den Bedingungen (I.68) und (I.69) genügen

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= 2\tfrac{1}{2} && \text{mit} && M_{\mathcal{J}} = 1\tfrac{1}{2},\ \tfrac{1}{2} \\ &= 2 && \text{"} && \phantom{M_{\mathcal{J}}} = 1,\ 0 \\ &= 1\tfrac{1}{2} && \text{"} && \phantom{M_{\mathcal{J}}} = \tfrac{1}{2} \\ &= 1 && \text{"} && \phantom{M_{\mathcal{J}}} = 1 \\ &= \tfrac{1}{2} && \text{"} && \phantom{M_{\mathcal{J}}} = \tfrac{1}{2} \end{aligned}$$

Es gibt also insgesamt 7 Transformations-Koeffizienten $\langle \mathcal{J}\mathcal{J}M_{\mathcal{J}}(2-3M_{\mathcal{J}})|5202\rangle$. Für größer werdende Senioritäten nimmt die Anzahl der Transformations-Koeffizienten rasch zu. Für v=36, l=0 gibt es z.B. schon 235, d.h. man muß ein lineares Gleichungssystem mit 235 Unbekannten lösen.

Im allgemeinen hat das homogene Gleichungssystem (I.67) eine Gleichung weniger als Unbekannte. Bei gleicher Anzahl n von linear unabhängigen Gleichungen und Unbekannten gäbe es ja auch nur die triviale Lösung, daß alle Unbekannten verschwinden. Bei (n-1) linear unabhängigen Gleichungen gegenüber n Unbekannten ist nur die Richtung des n-dimensionalen Lösungsvektors nicht aber seine Länge festgelegt. Dies ist auch

richtig so; denn wir müssen noch der Forderung nach Unitarität der Transformation (I.62) durch Normierung des Lösungsvektors auf 1 genügen. Falls die zusätzliche Quantenzahl α benötigt wird, hat das homogene Gleichungssystem mehrere linear unabhängige Lösungen. Um die Unitarität der Transformation (I.62) sicherzustellen, müssen sämtliche dieser linear unabhängigen Lösungsvektoren auf 1 normiert und zueinander orthogonalisiert werden.

Damit ist die 5. und letzte Etappe bei der Bestimmung der R(5)-Wigner-Koeffizienten in der physikalischen Basis beendet, und wir bekommen nun sehr schnell die gesuchten cfp. Dazu transformiert man mit den erhaltenen Transformations-Koeffizienten die R(5)-Wigner-Koeffizienten nach (I.62) von der mathematischen auf die physikalische Basis und setzt sie dann zusammen mit den SU(5)-Doppelstrich-Wigner-Koeffizienten und den gewöhnlichen R(3)-Clebsch-Gordan-Koeffizienten in die Formel für die cfp ein, die sich sofort aus (I.54) und (I.55) ergibt:

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1, v \ell \alpha \rangle = \frac{\langle (v')\ell'\alpha' m', (1) 2 0 (m-m') | (v) \ell \alpha m \rangle \langle [N] v'; [1] 1 \| [N+1] v \rangle}{\langle \ell' m', 2 (m-m') | \ell m \rangle} \qquad \text{(I.70)}$$

Die R(5)-Wigner-Koeffizienten besitzen eine den Clebsch-Gordan-Koeffizienten ähnliche Symmetrie-Eigenschaft:

$$\langle \ell' m', \lambda \mu | \ell m \rangle = (-)^{\ell - \ell' + \mu} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2\ell'+1}} \langle \ell m, \lambda -\mu | \ell' m' \rangle \quad \text{bei R(3)} \qquad \text{(I.71)}$$

$$\langle (v')\ell'\alpha' m'; (1) 2 0 \mu | (v) \ell \alpha m \rangle = (-)^{\mu} \sqrt{\frac{\dim(v)}{\dim(v')}} \langle (v) \ell \alpha m; (1) 2 0 -\mu | (v') \ell' \alpha' m' \rangle \quad \text{bei R(5)} \qquad \text{(I.72)}$$

wobei nach (I.38) $\dim(v) = \frac{1}{6}(v+1)(v+2)(2v+3)$ ist. Da außer (I.61) alle anderen SU(5)-Doppelstrich-Wigner-Koeffizienten für symmetrische Darstellungen verschwinden, gibt es zwei Arten von cfp:

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 |\} N+1, v'-1, \ell \alpha \rangle$$
$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 |\} N+1, v'+1, \ell \alpha \rangle \qquad \text{(I.73)}$$

Die Symmetrie-Relationen (I.71) und (I.72) der R(3)- und R(5)-Wigner-Koeffizienten kann man benutzen, um alle cfp auf solche vom Typ

$$\langle v v \ell' \alpha', 1120 |\} v+1, v+1, \ell \alpha \rangle$$

zurückzuführen. Setzt man nämlich (I.71) und (I.72) in (I.7) ein und verwendet man (I.61), so folgt beispielsweise für den ersten cfp von (I.73):

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 |\} N+1, v'-1, \ell \alpha \rangle =$$
$$(-)^{\ell-\ell'} \sqrt{\frac{\dim(v'-1)(2\ell'+1)}{\dim(v')(2\ell+1)}} \; \frac{\langle (v'-1)\ell\alpha m; (1)20(m'-m) / (v')\ell'\alpha' m' \rangle \langle [N]v'; [1]1 \| [N+1]v'-1 \rangle}{\langle \ell m, 2(m'-m) / \ell' m' \rangle} =$$
$$(-)^{\ell-\ell'} \sqrt{\frac{\dim(v'-1)(2\ell'+1)}{\dim(v')(2\ell+1)}} \; \frac{\langle [N]v'; [1]1 \| [N+1]v'-1 \rangle}{\langle [v'-1]v'-1; [1]1 \| [v']v' \rangle} \cdot$$
$$\frac{\langle (v'-1)\ell\alpha m; (1)20(m'-m) / (v')\ell'\alpha' m' \rangle \langle [v'-1]v'-1; [1]1 \| [v']v' \rangle}{\langle \ell m, 2(m'-m) / \ell' m' \rangle} =$$
$$(-)^{\ell-\ell'} \sqrt{\frac{\dim(v'-1)(2\ell'+1)}{\dim(v')(2\ell+1)}} \; \sqrt{\frac{(N-v'+2)(v'+2)(2v'+3)v'}{(2v'+1)(N+1)(v'+v'+3)v'}} \; \langle v'-1, v'-1, \ell\alpha, 1120 |\} v' v' \ell' \alpha' \rangle$$

also

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 |\} N+1, v'-1, \ell \alpha \rangle =$$
$$(-)^{\ell-\ell'} \sqrt{\frac{(N-v'+2)(v'+2)\dim(v'-1)(2\ell+1)}{(2v'+1)(N+1)\dim(v')(2\ell'+1)}} \; \langle v'-1, v'-1, \ell\alpha; 1120 |\} v' v' \ell' \alpha' \rangle$$

ebenso (I.74)

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 |\} N+1, v'+1, \ell \alpha \rangle =$$
$$\sqrt{\frac{(N+v'+5)(v'+1)}{(2v'+5)(N+1)}} \; \langle v' v' \ell' \alpha'; 1120 |\} v'+1, v'+1, \ell \alpha \rangle$$

Explizit berechnet zu werden brauchen demzufolge nur die cfp

$$\langle v' v' \ell' \alpha', 1120 |\} v'+1, v'+1, \ell \alpha \rangle$$

Der Grund dafür, daß wir uns so ausführlich mit den cfp für Spin 2-Phononen beschäftigt haben, ist ihr enger Zusammenhang mit den Matrixelementen des kollektiven Hamilton-Operators in der Basis des harmonischen Oszillators. Diese Verwandtschaft soll zum Abschluß dieses Kapitels aufgezeigt werden.

Die Eigenfunktionen des 5-dimensionalen harmonischen Oszillators bilden die einfachste Basis für Diagonalisierungen des kollektiven Hamilton-Operators $H(\dot{\alpha}_{2\mu}, \alpha_{2\mu})$, wenn man sich auf die wichtigsten Deformationsmöglichkeiten des Kerns, die quadrupoligen Deformationen gemäß

$$R = R_0 \left(1 + \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} (-)^{\mu} Y_{2-\mu}\right)$$

beschränkt. Alle Matrixelemente des Hamilton-Operators lassen sich in der Basis SU(5)$\supset$R(5)$\supset$R(3) nach den üblichen Regeln der Drehimpuls-Algebra auf reduzierte Matrixelemente der Erzeugungsoperatoren β^+_{μ} für Quadrupolphononen mit der Energie $\hbar\sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}}$, mit Spin 2 und Projektion μ und auf reduzierte Matrixelemente der Operatoren $(-)^{\mu}\beta_{-\mu}$, die sich kontragredient zu den Vernichtungsoperatoren β_{μ} transformieren, zurückführen, also auf Matrixelemente vom Typ:

$$\langle [N] v' \ell' \alpha' \| \beta \| [N+1] v \ell \alpha \rangle = (-)^{\ell - \ell'} \langle [N+1] v \ell \alpha \| \beta^+ \| [N] v' \ell' \alpha' \rangle^* \tag{I.75}$$

Wir ermitteln jetzt den Zusammenhang zwischen den reduzierten Matrixelementen (I.75) und den cfp $\langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1 v \ell \alpha \rangle$ für Spin 2-Phononen. Aus Gleichung (I.48) und aus $|1120\rangle = \beta^+_{\mu} |0\rangle$ folgt:

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1 v \ell \alpha \rangle \equiv \langle [N] v' \ell' \alpha', [1] 120; \ell m | [N+1] v \ell \alpha m \rangle =$$

$$\sum_{m' \mu} \frac{1}{\sqrt{N+1}} \langle \ell' m', 2\mu | \ell m \rangle \langle [N] v' \ell' \alpha' m' | \beta_{\mu} | [N+1] v \ell \alpha m \rangle \tag{I.76}$$

Anmerkung: Ursprünglich haben wir Produkte $|1\rangle|N\rangle$ mit $|1\rangle=\beta_\mu^+|0\rangle$. Wir aber schreiben statt $(\beta_\mu^+|0\rangle)|N\rangle$ stets $\beta_\mu^+|N\rangle$. Es gilt aber

einerseits $(\beta_\mu^+|0\rangle)|N\rangle = |1\rangle|N\rangle = |N+1\rangle$

andrerseits $\beta_\mu^+|N\rangle = \sqrt{N+1}\,|N+1\rangle$

Deshalb müssen wir in der letzten Zeile, wo die betreffenden Zustände allerdings links in den Matrixelementen auftreten, also $\langle N|\langle 1|$ statt $|1\rangle|N\rangle$; $\langle 0|\beta_\mu$ statt $\beta_\mu^+|0\rangle$ usw., durch $\sqrt{N+1}$ dividieren. Des weiteren muß das Matrixelement des Vernichtungsoperators in der letzten Zeile umgewandelt werden in das des Operators $(-)^\mu\beta_{-\mu}$, bevor das Wigner-Eckart-Theorem angewandt werden darf; denn dieses gilt nur für kovariante irreduzible Tensoroperatoren (Genaueres darüber im Abschnitt I.F.). Wir fahren fort:

$$\langle Nv'\ell'\alpha', 1120|\}N+1\,v\ell\alpha\rangle =$$

$$\sum_{m'\mu}\frac{1}{\sqrt{N+1}}\langle \ell'm', 2-\mu|\ell m\rangle(-)^\mu\langle[N]v'\ell'\alpha'm'|(-)^\mu\beta_{-\mu}|[N+1]v\ell\alpha m\rangle =$$

$$\sum_{m'\mu}\frac{1}{\sqrt{N+1}}\langle \ell'm', 2-\mu|\ell m\rangle\langle \ell m, 2\mu|\ell'm'\rangle\frac{(-)^\mu}{\sqrt{2\ell'+1}}\langle[N]v'\ell'\alpha'\|\beta\|[N+1]v\ell\alpha\rangle$$

Wegen (I.71) $\langle \ell m, 2\mu|\ell'm'\rangle \; (-)^{\ell'-\ell+\mu}\sqrt{\frac{2\ell'+1}{2\ell+1}}\langle \ell'm', 2-\mu|\ell m\rangle$ ergibt sich

$$\langle Nv'\ell'\alpha', 1120|\}N+1\,v\ell\alpha\rangle =$$

$$\underbrace{\sum_{m'\mu}\langle \ell'm', 2-\mu|\ell m\rangle\langle \ell'm', 2-\mu|\ell m\rangle}_{=1}\frac{1}{\sqrt{N+1}}\frac{(-)^{\ell'-\ell}}{\sqrt{2\ell+1}}\langle[N]v'\ell'\alpha'\|\beta\|[N+1]v\ell\alpha\rangle$$

Damit haben wir die Beziehungen zwischen den reduzierten Matrixelementen (I.75) und den cfp für Spin 2-Bosonen gefunden. Zusammengefaßt gelten folgende Relationen :

$$\langle [N] v' \ell' \alpha' \| \beta \| [N+1] v \ell \alpha \rangle = (-)^{\ell-\ell'} \langle [N+1] v \ell \alpha \| \beta^+ \| [N] v' \ell' \alpha' \rangle \quad (I.77)$$

(I.77) gilt statt (I.75), da die cfp reell sind.

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1 v \ell \alpha \rangle = \frac{(-)^{\ell'-\ell}}{\sqrt{N+1}\,\sqrt{2\ell+1}} \langle [N] v' \ell' \alpha' \| \beta \| [N+1] v \ell \alpha \rangle$$

$$\langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1 v \ell \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}\,\sqrt{2\ell+1}} \langle [N+1] v \ell \alpha \| \beta^+ \| [N] v' \ell' \alpha' \rangle \quad (I.78)$$

$$\langle [N] v' \ell' \alpha' \| \beta \| [N+1] v \ell \alpha \rangle = (-)^{\ell'-\ell} \sqrt{N+1}\,\sqrt{2\ell+1} \langle N v' \ell' \alpha', 1120 | \} N+1 v \ell \alpha \rangle$$

$$\langle [N+1] v' \ell' \alpha' \| \beta^+ \| [N] v \ell \alpha \rangle = \sqrt{N+1}\,\sqrt{2\ell'+1} \langle N v \ell \alpha, 1120 | \} N+1 v' \ell' \alpha' \rangle \quad (I.79)$$

Wegen der Eigenschaft (I.74) der cfp lassen sich alle reduzierten Matrixelemente ausdrücken durch solche mit $N' = v'$ und $N=v$. Aus (I.74), (I.78) und (I.79) bekommt man mühelos die Formeln:

$$\langle [N-1] v-1 \ell' \alpha' \| \beta \| [N] v \ell \alpha \rangle = \sqrt{\frac{N+v+3}{2v+3}} \langle [v-1] v-1 \ell' \alpha' \| \beta \| [v] v \ell \alpha \rangle$$

$$\langle [N-1] v+1 \ell' \alpha' \| \beta \| [N] v \ell \alpha \rangle = \sqrt{\frac{N-v}{2v+5}} \langle [v+1] v+1 \ell' \alpha' \| \beta^+ \| [v] v \ell \alpha \rangle$$

$$\langle [N+1] v-1 \ell' \alpha' \| \beta^+ \| [N] v \ell \alpha \rangle = \sqrt{\frac{N-v+2}{2v+3}} \langle [v-1] v-1 \ell' \alpha' \| \beta \| [v] v \ell \alpha \rangle \quad (I.80)$$

$$\langle [N+1] v+1 \ell' \alpha' \| \beta^+ \| [N] v \ell \alpha \rangle = \sqrt{\frac{N+v+5}{2v+5}} \langle [v+1] v+1 \ell' \alpha' \| \beta^+ \| [v] v \ell \alpha \rangle$$

F. Tensoren [8][17][18][19]

Die Abschnitte A. bis E. dieses ersten Kapitels bildeten eine Einheit. Sie sollten die gruppentheoretischen Methoden, die in der Berechnung der reduzierten Matrixelemente von β^+_μ und $(-)^\mu \beta_{-\mu}$ in der Oszillator-Basis $|[N]v\ell\alpha m\rangle$ mündeten, durchsichtig machen. Wir könnten nun in der Tat alle für die Dynamik unseres Modells (Kapitel III) erforderlichen Matrixelemente auf die genannten reduzierten zurückführen. In der Regel geschieht das auch; doch bestimmte Terme des Hamilton-Operators, die γ-unabhängigen nämlich (siehe Kapitel II Abschnitt C.) wurden direkter, vermöge der Vertauschungsrelationen, ermittelt. Bevor wir dieses Verfahren zeigen, seien aber die Eigenschaften, besonders das Transformationsverhalten, der Operatoren, mit denen wir später ständig arbeiten, geklärt. Gleichzeitig wird hier im rechten Zusammenhang der fünf-dimensionale Oszillator eingeführt, dessen Eigenfunktionen als Basis des Hilbertraumes dienen. Diese Zustände klassifizierten wir bereits gruppentheoretisch im Abschnitt I.D., wozu die Kenntnis der Symmetrie-Eigenschaften des Oszillators ausreichte.

k Größen bilden einen Tensor bezüglich einer Gruppe G linearer Transformationen des n-dimensionalen Raumes, wenn sie sich wie eine Basis eines k-dimensionalen Darstellungsraumes von G transformieren. Tensoren heißen reduzibel oder irreduzibel bezüglich G, je nachdem ob der entsprechende Darstellungsraum reduzibel oder irreduzibel ist. Die k Tensorkomponenten können z.B. sein: ein Satz von Einheitsvektoren oder die Menge der Komponenten eines festen Vektors, ein Satz von Eigenzuständen eines Operators oder die Entwicklungskoeffizienten einer Wellenfunktion nach einer Basis oder auch ein Satz von Operatoren.

Besteht zwischen den Darstellungsmatrizen $\mathcal{O}\!\mathcal{l}(g)$ und $\mathcal{B}(g)$, die zu zwei Tensoren A und B gehören, die Relation

$$\mathcal{B}(g) = \left[\mathcal{O}\!\mathcal{l}(g)^{-1} \right]^T \tag{I.81}$$

für alle $g \in G$ ($\mathcal{O}\!\mathcal{l}^T$ ist die zu $\mathcal{O}\!\mathcal{l}$ transponierte Matrix), dann nennt man

die Transformationen $\mathfrak{A}$ und $\mathfrak{B}$ und auch die **Tensoren** A und B selbst zueinander kontragredient. Gilt aber

$$\mathfrak{B}(g) = \mathfrak{A}(g) \tag{I.82}$$

für alle $g \in G$, so transformieren sich die Tensoren A und B gleich oder, wie man sagt, zueinader kogredient. Äquivalent mit (I.81) und darum genau so gut als Definition von "Kontragredienz" geeignet sind, wie wir jetzt beweisen wollen, zwei andere Aussagen:

1) Sei $\mathfrak{v}_1, \ldots, \mathfrak{v}_k$ eine Basis eines Vektorraumes, die einen Tensor bezüglich G bildet. In diesem Raum sei ein invarianter Vektor $\mathfrak{v}$ gegeben. Seine Komponenten bezüglich der Basis $\mathfrak{v}_i$ seien x_i :

$$\mathfrak{v} = \sum_i x_i \mathfrak{v}_i \tag{I.83}$$

Wir wenden die Gruppe auf das Koordinatensystem $\mathfrak{v}_i$ an; der Vektor $\mathfrak{v}$ aber bleibe fest. Die neuen Basiszustände $\mathfrak{v}_i'$ entstehen aus den alten durch die lineare Transformation (t_{ik}) :

$$\mathfrak{v}_i' = \sum_l t_{il} \mathfrak{v}_l \quad , \quad i = 1, \ldots, k \tag{I.84}$$

Statt mit Summenzeichen wollen wir von jetzt ab alle Beziehungen konsequent mit Matrizen formulieren, die einfacher zu handhaben sind. Wir führen folgende Matrizen ein:

$$\mathfrak{v} = \begin{pmatrix} \mathfrak{v}_1 \\ \vdots \\ \mathfrak{v}_k \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{v}' = \begin{pmatrix} \mathfrak{v}_1' \\ \vdots \\ \mathfrak{v}_k' \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{T} = \begin{pmatrix} t_{11} \cdots t_{1k} \\ \vdots \qquad \vdots \\ t_{k1} \cdots t_{kk} \end{pmatrix}, \quad \varphi = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix}, \quad \varphi' = \begin{pmatrix} x_1' \\ \vdots \\ x_k' \end{pmatrix} \tag{I.85}$$

Dann lauten (I.83) und (I.84):

$$\mathfrak{v} = \mathfrak{x}^T \mathfrak{e} \qquad \text{(I.86)}$$

$$\mathfrak{e}' = \mathcal{T}(g)\mathfrak{e} \qquad \text{(I.87)}$$

Die Komponenten des festen Vektors $\mathfrak{v}$ in der transformierten Basis $\mathfrak{e}_i'$ seien x_i' :

$$\mathfrak{v} = \mathfrak{x}'^T \mathfrak{e}' \qquad \text{(I.88)}$$

Wir fragen danach, wie sich die Komponenten von $\mathfrak{v}$ transformieren, $\mathfrak{x} \rightarrow \mathfrak{x}'$, wenn das Koordinatensystem die Transformation $\mathcal{T}$ erfährt (I.87). Aus (I.86) und (I.88) folgt

$$\mathfrak{x}'^T \mathfrak{e}' = \mathfrak{x}^T \mathfrak{e} \qquad \text{(I.89)}$$

Gleichung (I.87) eingesetzt ergibt

$$\mathfrak{x}'^T (\mathcal{T}\mathfrak{e}) = \mathfrak{x}^T \mathfrak{e}$$

Für die Matrizenmultiplikation gilt das Assoziativgesetz, also

$$(\mathfrak{x}'^T \mathcal{T})\mathfrak{e} = \mathfrak{x}^T \mathfrak{e}$$

d.h.

$$\mathfrak{x}'^T \mathcal{T} = \mathfrak{x}^T$$

oder

$$\mathfrak{x}'^T = \mathfrak{x}^T \mathcal{T}^{-1}$$

Transponiert man diese Gleichung, so hat man das Resultat

$$\mathfrak{x}' = \left[\mathcal{T}^{-1}_{(g)}\right]^T \mathfrak{x} \qquad \text{(I.90)}$$

Vektorkomponenten transformieren sich somit stets kontragredient zur Basis. In speziellen Fällen kann die Basis natürlich aus Hilbert-

vektoren $|i\rangle$ bestehen, die einen Teilraum des Hilbertraumes aufspannen; die Vektorkomponenten x_i entsprechen dann den Entwicklungskoeffizienten $\langle i|\Psi\rangle$ einer Wellenfunktion Ψ nach dieser Basis.

Wie aus den bisherigen Ausführungen hervorgegangen ist, bezeichnen Ko- und Kontragredienz gegenseitige Eigenschaften, die erst bei Angabe eines Bezugstensors einen Sinn erhalten. Um nicht immer ein Bezugssystem angeben zu müssen, bezeichnet man zu den Grundvektoren kogrediente Größen als <u>kovariant</u> (oft durch untere Indizes charakterisiert) und zu den Komponenten kogrediente, d.h. zu den Grundvektoren kontragrediente Größen, als <u>kontravariant</u> (oft durch obere Indizes gekennzeichnet).

2) Wir kommen zur zweiten Aussage, die als Definition von "Kontragredienz" verwendet werden kann. Gegeben sei ein Tensor

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} R_1 \\ \vdots \\ R_K \end{pmatrix}$$

bezüglich G. Seine Transformation bei Anwendung von G laute:

$$\mathcal{R}' = \mathcal{T}(g)\,\mathcal{R}$$

Ein zweiter Tensor $\mathcal{S} = \begin{pmatrix} S_1 \\ \vdots \\ S_K \end{pmatrix}$ ist genau dann kontragredient zu $\mathcal{R}$, wenn gilt

$$\mathcal{S}^T \mathcal{R} \equiv \sum_i S_i R_i \quad = \text{invariant (Skalar) bezügl. G} \qquad \text{(I.91)}$$

Der Beweis ist sehr einfach. Nach Voraussetzung (I.91) haben wir:

$$\mathcal{S}'^T \mathcal{R}' = \mathcal{S}^T \mathcal{R}$$

Das ist aber bis auf die Bezeichnung identisch mit (I.89), und darum muß auch hier das Ergebnis wie folgt lauten:

$$\mathcal{S}' = [\mathcal{T}(g)^{-1}]^T \mathcal{S}$$

Die Beziehung (I.81) $\mathfrak{B} = [\mathfrak{A}^{-1}]^T$ zwischen kontragredienten Matrizen besteht nach Definition unabhängig davon, ob wir uns im Reellen oder Komplexen befinden. Allerdings vereinfacht sich diese Relation für spezielle Darstellungsmatrizen. Falls die Transformationen $\mathfrak{A}$ unitär sind (also immer dann, wenn orthonormierte Basen ineinander überführt werden), heißt wegen $\mathfrak{A}^+ \equiv (\mathfrak{A}^*)^T = \mathfrak{A}^{-1}$ die Kontragredienz-Beziehung einfach

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{A}^* \quad \text{(z.B. bei den Rotationsmatrizen)} \tag{I.92}$$

Falls $\mathfrak{A}$ reell und orthogonal ist, $\mathfrak{A}^T = \mathfrak{A}^{-1}$, folgt sogar

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{A} \tag{I.93}$$

d.h. der Unterschied von Ko- und Kontravarianz verschwindet.

Nun zu unserem eigentlichen Anliegen. Die Basen $|LM\rangle$, M=-L,...,+L, für die Multipletts $L^{(L)}$ von R(3) bilden nach unseren Definitionen einen kovarianten (uns sogar irreduziblen) Tensor bezüglich R(3). Die Kugelfunktionen Y_{LM} und die sogenannten irreduziblen Tensoroperatoren $T_M^{[L]}$ transformieren sich genauso wie die $|LM\rangle$ (die $T_M^{[L]}$ durch Definition, siehe Abschnitt I.B.) und stellen somit ebenfalls kovariante Tensoren $Y^{[L]}$ und $T^{[L]}$ bezüglich R(3) dar. (Übrigens gilt für manche Systeme $D_{MM'}^{(L)} \equiv |LM\rangle$). Da im folgenden als Transformationen nur die Rotationen des drei-dimensionalen Raumes in Frage kommen, erwähnen wir nicht länger ausdrücklich, daß die Tensoren solche bezüglich R(3) sind. Außerdem behandeln wir stellvertretend für alle anderen Werte nur L=2. Es gilt

$$[T^{[2]} \times T^{[2]}]^{[0]} \equiv \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_M T_M^{[2]} (-)^M T_{-M}^{[2]} = \text{invariant} \tag{I.94}$$

Benutzt man (I.91) als Defination der Kontragredienz, so erkennen wir:

Der Tensor $T^{(2)}$ mit der M.Komponente

$$T_M^{(2)} = (-)^M \, T_{-M}^{[2]} \tag{I.95}$$

ist kontragredient zu $T^{[2]}$ (mit der M.Komponente $T_M^{[2]}$) und darum ein kontravarianter irreduzibler Tensor. Eckige Klammern symbolisieren auch im weiteren kovariante Tensoren und deren Komponenten, runde Klammern kontravariante. Nach (I.95) bilden die Funktionen $(-)^\mu Y_{2-\mu}$ die μ. Komponenten eines kontravarianten Tensors $Y^{(2)}$. Deshalb impliziert nach Definition (I.91) der Ansatz

$$R = R_0 \left(1 + \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right) \tag{I.96}$$

für den Kernradius zusammen mit dessen Invarianz bei Rotationen des Koordinatensystems die Kovarianz des Tensors $\alpha^{[2]}$ mit der μ. Komponente $\alpha_{2\mu}$. Aus $(-)^\mu Y_{2-\mu} = Y_{2\mu}^*$ und der Realität des Radius R folgt außerdem auch die Beziehung $(-)^\mu \alpha_{2-\mu} = \alpha_{2\mu}^*$ für die Kollektivkoordinaten $\alpha_{2\mu}$. Die kanonische Quantisierung des harmonischen Oszillators, der sich aus den kollektiven Variablen $\alpha_{2\mu}$ rotationsinvariant bilden läßt,

$$\begin{aligned} H' &= B_2' \left[\dot{\alpha}^{[2]} \times \dot{\alpha}^{[2]}\right]^{[0]} + C_2' \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} = \\ &\frac{B_2'}{\sqrt{5}} \sum_\mu \dot{\alpha}_{2\mu} (-)^\mu \dot{\alpha}_{2-\mu} + \frac{C_2'}{\sqrt{5}} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} \end{aligned} \tag{I.97}$$

lautet

$$\begin{aligned} [\alpha_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}] &= [\Pi_{2\mu}, \Pi_{2\mu'}] = 0 \\ [\Pi_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{\mu\mu'} \end{aligned} \tag{I.98}$$

wobei $\Pi_{2\mu}$ der zu $\alpha_{2\mu}$ kanonisch konjugierte Impuls ist, der durch

$$\Pi_{2\mu} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}_{2\mu}} \tag{I.99}$$

aus der Lagrange-Funktion

$$L = \frac{B_2'}{\sqrt{5}} \sum_\nu \dot{\alpha}_{2\nu} (-)^\nu \dot{\alpha}_{2-\nu} - \frac{C_2'}{\sqrt{5}} \sum_\nu \alpha_{2\nu} (-)^\nu \alpha_{2-\nu} \tag{I.100}$$

herzuleiten ist. Für $\nu = \pm\mu$ liefert die Summe bei der Differentiation (I.99) den Beitrag $\frac{B_2'}{\sqrt{5}} (-)^\mu \dot{\alpha}_{2-\mu}$, also

$$\Pi_{2\mu} = \frac{2}{\sqrt{5}} B_2' (-)^\mu \dot{\alpha}_{2-\mu} \tag{I.101}$$

Da sich die $\dot{\alpha}_{2\mu}$ bei Raumdrehungen natürlich wie die $\alpha_{2\mu}$ transformieren (sie unterscheiden sich nur durch den skalaren Faktor "Zeit") und darum einen kovarianten irreduziblen Tensor $\dot{\alpha}^{[2]}$ bilden, sind $(-)^\mu \dot{\alpha}_{2-\mu}$ und $\Pi_{2\mu}$ die μ. Komponenten von kontravarianten irreduziblen Tensoren $\dot{\alpha}^{(2)}$ bzw. $\Pi^{(2)}$. Die kanonisch konjugierten Variablen (Operatoren) $\alpha_{2\mu}$ und $\Pi_{2\mu}$ transformieren sich demnach kontragredient zueinander. Daß die die $\Pi_{2\mu}$ transformierenden Matrizen die komplex-konjugierten Rotationsmatrizen sind, folgt automatisch (siehe (I.92)).

Die Kontravarianz der kanonischen Impulse $\Pi_{2\mu}$ bedeutet, daß sie <u>keinen</u> "irreduziblen Tensoroperator" nach unserem Sprachgebrauch bilden; denn diese sind definiert als solche Sätze von Operatoren, die sich <u>wie</u> die Basis $|LM\rangle$ transformieren, die also kovariante Tensoren sind. Beispielsweise ist das Wigner-Eckart-Theorem für $\Pi_{2\mu}$ <u>nicht</u> anwendbar. Die Kopplung zweier kontravarianter irreduzibler Tensoren zu einem dritten kontravarianten irreduziblen Tensor geschieht zwar nach genau den gleichen Regeln wie für kovariante Tensoren; doch ist dies nur der Realität der Clebsch-Gordan-Koeffizienten zu verdanken. Ko- und kontravariante Tensoren lassen sich da-

gegen überhaupt nicht miteinander koppeln, es sei denn, man wandelt vorher einen von beiden gemäß (I.95) in den dazu kontragredienten um.

Für die 2.Quantisierung des harmonischen Oszillators ist folgender Ansatz gebräuchlich:

$$\begin{aligned} \alpha_{2\mu} &= \frac{1}{2}\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}}\left(\beta_\mu^+ + (-)^\mu \beta_{-\mu}\right) \\ \Pi_{2\mu} &= -i\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}}\left(\beta_\mu - (-)^\mu \beta_{-\mu}^+\right) \end{aligned} \qquad \text{(I.102)}$$

womit die Kommuatoren (I.98) auf die Bosonen-Vertauschungsrelationen für β_μ^+ und β_μ geführt werden:

$$\begin{aligned} [\beta_\mu, \beta_{\mu'}] = [\beta_\mu^+, \beta_{\mu'}^+] &= 0 \\ [\beta_\mu, \beta_{\mu'}^+] &= \delta_{\mu\mu'} \end{aligned} \qquad \text{(I.103)}$$

Da sich nur Tensoren gleichen Transformationsverhaltens komponentenweise addieren lassen, ist mit (I.102) stillschweigend festgelegt, daß die β_μ^+ den kovarianten irreduziblen Tensor $\beta^{+[2]}$ bilden und die dazu adjungierten Operatoren β_μ die μ. Komponenten des kontravarianten Tensors $\beta^{(2)}$ sind. $(-)^\mu \beta_{-\mu}^+$ und $(-)^\mu \beta_{-\mu}$ sind umgekehrt die μ. Komponenten des kontravarianten Tensors $\beta^{+(2)}$ bzw. kovarianten Tensors $\beta^{[2]}$. Aus (I.103) liest man ab, daß die zueinander adjungierten und zueinander kontragredienten Operatoren β_μ^+ und β_μ (und nicht $(-)^\mu \beta_{-\mu}$) Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Spin 2-Phononen mit Projektionen μ sind. Auf Matrixelemente des Vernichtungsoperators β_μ, einer Komponente des kontravarianten Tensors $\beta^{(2)}$, darf natürlich nicht das Wigner-Eckart-Theorem angewendet werden; darum mußten wir im Abschnitt I.E. Formel (I.76) das Matrixelement umwandeln in eines von $(-)^\mu \beta_{-\mu}$. Die reduzierten Matrixelemente $\langle [N] v'\ell'\alpha' \| \beta \| [N+1] v\ell\alpha \rangle$ sind also streng genommen keine reduzierten Matrixelemente der Vernichtungsoperatoren sondern von Komponenten des dazu kontragredienten Tensors $\beta^{[2]}$. Der Ansatz (I.102) ist willkürlich und nur deshalb be-

liebt (und wird auch von uns benutzt), weil er über die Vertauschungsrelationen (I.103) β^+_μ und β_μ ohne zusätzliche Phasen als Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren festlegt und einen einfachen Hamilton-Operator garantiert:

$$H' = \hbar \sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}} \left[\sum_\mu \beta^+_\mu \beta_\mu + \frac{5}{2} \right] \qquad \text{(I.104)}$$

Der Ausdruck

$$N = \sum_\mu \beta^+_\mu \beta_\mu = \sqrt{5} \left[\beta^{+[2]} \times \beta^{[2]} \right]^{[0]} \qquad \text{(I.105)}$$

ist, wie immer in 2.Quantisierung, der (Gesamt)Anzahloperator, so daß man auch schreiben kann

$$H' = \hbar \sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}} \left[N + \frac{5}{2} \right] \qquad \text{(I.106)}$$

Die Energie eines Anregungsquants (eines Phonons) ist folglich $E = \hbar \sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}}$ und die möglichen Energien des harmonischen Oszillators sind

$$E_N = \hbar \sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}} \left(N + \frac{5}{2} \right) \quad , \ N = 0,1,2,\ldots$$

Verwendete man den Ansatz

$$\alpha_{2\mu} = \frac{1}{2} \sqrt{\hbar \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}} \left(\beta^+_\mu + \beta_\mu \right)$$

$$\Pi_{2\mu} = -i \sqrt{\hbar \sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}} \left((-)^\mu \beta_{-\mu} - (-)^\mu \beta^+_{-\mu} \right)$$

dann bildeten sowohl die β^+_μ als auch die β_μ einen kovarianten Tensor $\beta^{+[2]}$ bzw. $\beta^{[2]}$. Allerdings hätten wir statt (I.103) andere Vertauschungsrelationen, und nicht β_μ sondern $(-)^\mu \beta_{-\mu}$, das sich dann kontragredient zu β^+_μ transformierte, wäre der Vernichtungsoperator.

Die Situation ändert sich wieder völlig, wenn man den Radius anders als (I.96) ansetzt, z.B.

$$R = R_0 \left(1 + \sum_\mu \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}\right)$$

Hier sind statt der $\alpha_{2\mu}$ die $(-)^\mu \alpha_{2-\mu}$ μ.Komponenten des kovarianten Tensors $\alpha^{[2]}$. Die $\alpha_{2\mu}$ stellen in diesem Falle keine "irreduziblen Tensoroperatoren" dar, für die das Wigner-Eckart-Theorem Gültigkeit besitzt.

Wir halten uns in dieser Arbeit konsequent an die Ansätze (I.96), (I.97) und (I.102). Die kovarianten Tensoren $\beta^{+[2]}$ und $\beta^{[2]}$ kürzen wir im weiteren stets ab mit β^+ und β.

G. Auswahlregeln und spezielle Matrixelemente

Wie angekündigt sollen nun die Matrixelemente spezieller Operatoren mittels der Vertauschungsrelationen (I.103) berechnet werden. Es handelt sich um folgende drei Skalare, aus denen sich die γ-unabhängigen Terme des Hamilton-Operators (siehe II.C.) in einfacher Weise zusammensetzen:

$$\begin{gathered}[\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \\ [\beta \times \beta]^{[0]} \\ [\beta^+ \times \beta]^{[0]} + [\beta \times \beta^+]^{[0]}\end{gathered} \qquad (I.107)$$

Wir beginnen mit der Zusammenstellung der Auswahlregeln für Matrixelemente der grundlegenden Operatoren β^+_μ, $(-)^\mu \beta_{-\mu}$ sowie der Ausdrücke (I.107) in der Oszillator-Basis $|[N] v \ell \alpha m\rangle$. Die Auswahlregeln leiten sich ab

a. bezüglich N aus der Eigenschaft der Operatoren β^+_μ und β_μ als Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren,

b. " v aus der Bedeutung der Seniorität als Anzahl der Phononen, die nicht paarweise zu 0 gekoppelt sind,

c. " l aus dem Wigner-Eckart-Theorem (Dreiecksregel),

d. " α aus Vereinbarungen über die Durchzählung der Drehimpuls-Vielfachheiten,

e. " m aus dem Wigner-Eckart-Theorem.

Zu b.: Wird ein Phonon vernichtet, das nicht mit einem anderen zu 0 gekoppelt war, verringert sich die Seniorität um eins, wird eines vernichtet, das abgepaart war, entsteht ein zusätzliches nicht zu 0 gekoppeltes Phonon (nämlich der Partner des vernichteten), d.h. die Seniorität nimmt um eins zu. Andere Fälle sind nicht denkbar. Für β^+_μ gilt die entsprechende Überlegung. $[\beta \times \beta]^{[0]}$ vernichtet ein zu 0 gekoppeltes Paar, also ändert sich v nicht, und dasselbe trifft für $[\beta^+ \times \beta^+]^{[0]}$ zu.

Zu d.: α ist keine echte Quantenzahl. Es ist kein Eigenwert eines Operators, sondern zählt die zueinander orthogonalen Drehimpulsräume mit gleichem l innerhalb eines R(5)-Multipletts durch. Anschaulicher: α markiert die verschiedenen Möglichkeiten der Zwischendrehimpulse, wenn sich insgesamt v nicht zu 0 gekoppelte Phononen zum Gesamtdrehimpuls l zusammensetzen. Die Art abzuzählen ist willkürlich, und damit sind Auswahlregeln gegenstandslos. Vereinbart man aber, bei Zuständen gleicher Seniorität v und gleichen "mehrfachen" Drehimpulses l, die sich in der Phononenzahl N unterscheiden, diejenigen mit identischer Zwischenkopplung durch die gleiche Nummer α zu kennzeichnen, dann bekommen Auswahlregeln bezüglich α einen Sinn. Fügt man z.B. zu einem System ein zu 0 gekoppeltes Phononenpaar hinzu, so bleiben die Zwischendrehimpulse der v nicht abgepaarten Phononen erhalten, mit anderen Worten: die Auswahlregel für $[\beta^+ \times \beta^+]^{[0]}$ ist $\Delta\alpha = 0$.

Nach diesen Erläuterungen geben wir die Tabelle der Auswahlregeln für die Matrixelemente

$$\langle [N'] v' \ell' \alpha' m' \,|\, OP \,|\, [N] v \ell \alpha m \rangle$$

der erwähnten 5 grundlegenden Operatoren.

	$\Delta N = N'-N$	$\Delta v = v'-v$	$\Delta \ell = \ell'-\ell$	$\Delta\alpha = \alpha - \alpha$	$\Delta m = m'-m$
β^+_μ	1	± 1	0, ± 1, ± 2	0 od. ≠ 0	μ
$(-)^\mu \beta_{-\mu}$	-1	± 1	0, ± 1, ± 2	0 od. ≠ 0	μ
$[\beta^+ \times \beta^+]^{[0]}$	2	0	0	0	0
$[\beta \times \beta]^{[0]}$	-2	0	0	0	0
$[\beta^+ \times \beta]^{[0]} + [\beta \times \beta^+]^{[0]}$	0	0	0	0	0

(I.108)

Außerdem verschwinden die Matrixelemente natürlich immer dann, wenn eine der Kombinationen N, v, l, α, m oder N′, v′, l′, α', m′ der Quantenzahlen nach Abschnitt I.D. nicht zulässig ist.

Wir gehen über zur Ermittlung der Matrixelemente der Skalare (I.107). Gebraucht wird die Vertauschungsregel für [14][20]

$$\left[[\beta \times \beta]^{[0]}, [\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \right] =$$

$$\frac{1}{5} \left(\sum_{\mu\nu} (-)^{\mu+\nu} \beta_\mu \beta_{-\mu} \beta_\nu^+ \beta_{-\nu}^+ - \sum_{\mu\nu} (-)^{\mu+\nu} \beta_\mu^+ \beta_{-\mu}^+ \beta_\nu \beta_{-\nu} \right) =$$

$$\frac{2}{5} \left(\sum_{\mu \neq 0} (\beta_\mu \beta_{-\mu} \beta_\mu^+ \beta_{-\mu}^+ - \beta_\mu^+ \beta_{-\mu}^+ \beta_\mu \beta_{-\mu}) \right) + \frac{1}{5} \left(\beta_0 \beta_0 \beta_0^+ \beta_0^+ - \beta_0^+ \beta_0^+ \beta_0 \beta_0 \right)$$

Durchschieben der Vernichtungsoperatoren nach rechts führt auf

$$\left[[\beta \times \beta]^{[0]}, [\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \right] = \frac{4}{5} \sum_\mu \beta_\mu^+ \beta_\mu + 2 = \frac{4}{5} N + 2 \qquad \text{(I.109)}$$

Weiterhin wird benutzt

$$N \, |[N] v \ell \alpha m\rangle = N \, |[N] v \ell \alpha m\rangle \qquad \text{(I.110)}$$

$$[\beta \times \beta]^{[0]} \, |[v] v \ell \alpha m\rangle = 0 \qquad \text{(I.111)}$$

(I.110) gilt allgemein in 2.Quantisierung und braucht deshalb nicht hergeleitet zu werden. In (I.111) wird die Seniorität durch den Operator nach (I.108) unverändert gelassen, wohl aber wird N (hier ursprünglich gleich v) erniedrigt. Doch Zustände mit $N < v$ existieren nach Abschnitt I.D. nicht.

Die Konstante C(v+2,v) in $[\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \, |[v] v \ell \alpha m\rangle = \sqrt{C(v+2,v)} \, |[v+2] v \ell \alpha m\rangle$

bestimmt man aus der Normierung der Oszillator-Funktion mit Hilfe von (I.109) bis (I.111).

$$\begin{aligned} c(v+2,v) &= \langle [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \,|\, [\beta \times \beta]^{[0]} [\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \\ &= \langle [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \,|\, \tfrac{4}{5} N + 2 + [\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} [\beta \times \beta]^{[0]} \,|\, [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \\ &= \tfrac{4}{5} v + 2 \end{aligned}$$

Also

$$[\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle = \sqrt{\tfrac{4}{5} v + 2}\; |\, [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \qquad \text{(I.112)}$$

$$[\beta \times \beta]^{[0]} \,|\, [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle = \sqrt{\tfrac{4}{5} v + 2}\; |\, [v]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \qquad \text{(I.113)}$$

Das unbestimmte Wurzelvorzeichen haben wir positiv gewählt. Nachher wird die Konsistenz der Phasen nachgewiesen. Wir fahren fort, und bestimmen jetzt c(v+4,v):

$$[\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle = \sqrt{c(v+4,v)}\; |\, [v+4]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle$$

$$\begin{aligned} c(v+4,v) \quad & \langle [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \,|\, [\beta \times \beta]^{[0]} [\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \\ & \langle [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \,|\, \tfrac{4}{5} N + 2 + [\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} [\beta \times \beta]^{[0]} \,|\, [v+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \\ & \tfrac{4}{5}(v+2) + 2 + c(v+2,v) \end{aligned}$$

Durch Wiederholung dieser Schritte bekommt man für die Konstanten $c(v+2\mu,v)$ in

$$[\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [v+2\mu-2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle = \sqrt{c(v+2\mu,v)}\; |\, [v+2\mu]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle \qquad \text{(I.114)}$$

die Rekursionsformel

$$c(v+2\mu,v) = \tfrac{4}{5}[v+2(\mu-1)] + 2 + c(v+2\mu-2,v) \qquad \text{(I.115)}$$

oder, wenn man aufaddiert:

$$c(v+2\mu,v) = \frac{4}{5}\left[v+(v+2)+\ldots+(v+2(\mu-1))\right]+2\mu$$
$$= \frac{2}{5}\mu\left[2v+2\mu+3\right] \qquad \text{(I.116)}$$

Bedenkt man, daß in (I.114) $v+2\mu-2=N$ oder $\mu = \frac{1}{2}(N-v+2)$ ist, so folgt aus (I.116):

$$c(N+2,v) = \frac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5) \qquad \text{(I.117)}$$

Gleichung (I.114) von links mit $\langle [v+2\mu]\, v\, \ell\, \alpha\, m|$ multipliziert und (I.117) eingesetzt liefert die geschlossenen Ausdrücke für die Matrixelemente von $[\beta^+\times\beta^+]^{[0]}$ und damit auch $[\beta\times\beta]^{[0]}$ für beliebige Quantenzahlen. Diese Matrixelemente hängen nur von N und v ab:

$$\langle [N+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m\,|\,[\beta^+\times\beta^+]^{[0]}\,|\,[N]\, v\, \ell\, \alpha\, m\rangle = \sqrt{\frac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5)} \qquad \text{(I.118)}$$

$$\langle [N-2]\, v\, \ell\, \alpha\, m\,|\,[\beta\times\beta]^{[0]}\,|\,[N]\, v\, \ell\, \alpha\, m\rangle = \sqrt{\frac{1}{5}(N-v)(N+v+3)} \qquad \text{(I.119)}$$

Die Matrixelemente des dritten der Operatoren (I.107) sind schnell ermittelt. Auf Grund der Vertauschungsrelation (I.103) gilt

$$[\beta\times\beta^+]^{[0]} = \frac{1}{\sqrt{5}}\sum_\mu \beta_\mu\beta_\mu^+$$
$$= \frac{1}{\sqrt{5}}\sum_\mu\left[\beta_\mu^+\beta_\mu+1\right]$$
$$= [\beta^+\times\beta]^{[0]}+\sqrt{5}$$

Wegen (I.105) gilt somit

$$[\beta^+ \times \beta]^{[0]} + [\beta \times \beta^+]^{[0]} = 2\,[\beta^+ \times \beta]^{[0]} + \sqrt{5} = \frac{1}{\sqrt{5}}\,(2N+5) \qquad \text{(I.120)}$$

Es folgt

$$\langle [N] v \ell \alpha m \,|\, [\beta^+ \times \beta]^{[0]} + [\beta \times \beta^+]^{[0]} \,|\, [N] v \ell \alpha m \rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\,(2N+5) \qquad \text{(I.121)}$$

Wir verwenden zwei unabhängige Verfahren, um die Energiematrix aufzustellen: Die γ-abhängigen Terme des Hamilton-Operators führen wir auf die reduzierten Matrixelemente von β^+_μ und $(-)^\mu\,\beta_{-\mu}$ zurück (Abschnitt I.E.), die γ-unabhängigen auf die Matrixelemente (I.118), (I.119) und (I.121). Die Wahl des negativen Wurzelvorzeichens in (I.118) und (I.119) wäre gleichbedeutend mit der Umkehr der Phasen einer der beiden Wellenfunktionen. Tatsächlich sind die Phasen von Wellenfunktionen stets willkürlich, aber während der Lösung eines Problems müssen die einmal gewählten Phasen, damit nicht alles falsch wird, beibehalten werden. In unserem Falle ist deshalb die Frage zu klären, ob die Phasen der Basis-Wellenfunktionen in beiden Verfahren zur Ermittlung von Matrixelementen konsistent sind. Wir führen daher als Beispiel (I.118) auf die reduzierten Matrixelemente von β^+_μ und $(-)^\mu\,\beta_{-\mu}$ zurück. Falls man dann schließen kann, daß das Matrixelement für beliebige Quantenzahlen positiv wird, so stimmen die Phasen.

$$\langle [N+2] v \ell \alpha m \,|\, [\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \,|\, [N] v \ell \alpha m \rangle =$$

$$(-)^{\ell-m} \begin{pmatrix} \ell & 0 & \ell \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} \langle [N+2] v \ell \alpha \,\|\, [\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} \,\|\, [N] v \ell \alpha \rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \sum_{v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ \ell & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N+2] v \ell \alpha \,\|\, \beta^+ \,\|\, [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \rangle \langle [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \,\|\, \beta^+ \,\|\, [N] v \ell \alpha \rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{5}}\,\frac{1}{2\ell+1} \sum_{v''\ell''\alpha''} (-)^{\ell+\ell''} \langle [N+2] v \ell \alpha \,\|\, \beta^+ \,\|\, [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \rangle \langle [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \,\|\, \beta^+ \,\|\, [N] v \ell \alpha \rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{5}}\,\frac{1}{2\ell+1} \sum_{v''\ell''\alpha''} \langle [N+2] v \ell \alpha \,\|\, \beta^+ \,\|\, [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \rangle \langle [N] v \ell \alpha \,\|\, \beta \,\|\, [N+1] v'' \ell'' \alpha'' \rangle$$

Im letzten Schritt wurde (I.77) benutzt. Mit (I.80) folgt:

$$\langle [N+2]\, v\, \ell\, \alpha\, m \,|\, [\beta^{+} \times \beta^{+}]^{[0]} \,|\, [N]\, v\, \ell\, \alpha\, m \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{5}}\,\frac{1}{2\ell+1} \sum_{\ell''\alpha''} \Big[\langle [N+2]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta^{+} \| [N+1]\, v-1\, \ell''\alpha'' \rangle \langle [N]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta \| [N+1]\, v-1\, \ell''\alpha'' \rangle$$
$$+ \langle [N+2]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta^{+} \| [N+1]\, v+1\, \ell''\alpha'' \rangle \langle [N]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta \| [N+1]\, v+1\, \ell''\alpha'' \rangle \Big]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{5}}\,\frac{1}{2\ell+1} \sum_{\ell''\alpha''} \Big[\sqrt{\frac{(N+v+5)(N-v+2)}{(2v+3)(2v+3)}}\, \langle [v]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta^{+} \| [v-1]\, v-1\, \ell''\alpha'' \rangle^{2}$$
$$\sqrt{\frac{(N-v+2)(N+v+5)}{(2v+5)(2v+5)}}\, \langle [v]\, v\, \ell\, \alpha \| \beta \| [v+1]\, v+1\, \ell''\alpha'' \rangle^{2} \Big]$$

Die reduzierten Matrixelemente kommen quadratisch vor, das Ergebnis ist somit positiv und die Konsistenz der Phasen bewiesen.

Kapitel II

DIE KOLLEKTIVE POTENTIALFLÄCHE

A. Definition der kollektiven Potentialfläche

Quadrupol-Deformationen des Kerns werden beschrieben durch

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0 \left[1 + \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu} \right] \tag{II.1}$$

Uneingeschränkte zeitliche Änderungen der fünf kollektiven Variablen $\alpha_{2\mu}$, $\mu = -2,\dots,+2$ führen gleichermaßen zu Vibrationen und Rotationen. Alle Kerneigenschaften, die auf Quadrupol-Bewegung beruhen, drücken sich durch die Koordinaten $\alpha_{2\mu}$ aus, speziell auch der Hamilton-Operator:

$$H = T(\dot{\alpha}_{2\mu}, \alpha_{2\mu}) + V(\alpha_{2\mu}) \tag{II.2}$$

Wegen der Vermischung von Rotationen und Vibrationen ist dieser Formulierung des Hamilton-Operators die Beschaffenheit des Kerns nicht anzusehen. Für diesen Zwecke benötigen wir vielmehr die inneren, d.h. von den Rotationen bereinigten, Eigenschaften der potentiellen Energie $V(\alpha_{2\mu})$. Um Rotationen und Vibrationen voneinander zu trennen, legen wir ein "Intrinsic-System" des Kerns fest. Dazu ersetzen wir zunächst in (II.1) die sphärischen Komponenten der irreduziblen Tensoren $\alpha^{[2]}$ und $Y^{[2]}$ durch die cartesischen [21] [22] :

$$\begin{aligned} \alpha_{20} &= \sqrt{\frac{4\pi}{45}} \left(2\alpha_{zz} - \alpha_{xx} - \alpha_{yy}\right) \\ \alpha_{2\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{8\pi}{15}} \left(\alpha_{xz} \pm i\alpha_{yz}\right) \\ \alpha_{2\pm2} &= \sqrt{\frac{2\pi}{15}} \left(\alpha_{xx} - \alpha_{yy} \pm 2i\alpha_{xy}\right) \end{aligned} \tag{II.3}$$

$$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz} = 0$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \; \frac{2z^2-x^2-y^2}{R^2}$$

$$Y_{2\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \; \frac{xz \pm iyz}{R^2} \qquad \text{(II.4)}$$

$$Y_{2\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \; \frac{x^2-y^2 \pm 2ixy}{R^2}$$

$$x^2+y^2+z^2 = R^2$$

Dies liefert:

$$R = R_0 \left[1 + \alpha_{xx}\frac{x^2}{R^2} + \alpha_{yy}\frac{y^2}{R^2} + \alpha_{zz}\frac{z^2}{R^2} + 2\alpha_{xy}\frac{xy}{R^2} + 2\alpha_{xz}\frac{xz}{R^2} + 2\alpha_{yz}\frac{yz}{R^2} \right] \qquad \text{(II.5)}$$

Als Intrinsic-System wählen wir nun solche Koordinaten-Systeme, in denen die Deviationsmomente $\alpha_{xy}, \alpha_{xz}, \alpha_{yz}$ verschwinden, die also mit den Hauptachsen zusammenfallen. Diese Forderung läßt sich auf Grund von (II.3) gleichwertig durch die sphärischen Komponenten formulieren:

$$\alpha_{xy} = \alpha_{xz} = \alpha_{yz} = 0 \qquad \text{in cartes. Komponenten}$$

$$\alpha_{21} = \alpha_{2-1} = 0, \; \alpha_{22} = \alpha_{2-2} \qquad \text{in sphär. Komponenten} \qquad \text{(II.6)}$$

Von nun ab lassen wir die cartesischen Komponenten der Tensoren $\alpha^{[2]}$ und $Y^{[2]}$, die wir nur zur Festlegung des Intrinsic-Systems einführten, wieder fallen und bezeichnen die Koordinaten $\alpha_{2\mu}$, die der Bedingung (II.6) unterliegen, mit a_μ. Außerdem werden wir statt a_0 und a_2 oft die zugehörigen "Polarkoordinaten" β und γ verwenden:

$$a_0 = \beta\cos\gamma$$

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\beta\sin\gamma \qquad \text{(II.7)}$$

Da wir uns durch die Verfügung (II.6) in ein mitrotierendes System begeben, spalten wir die drei Rotationsfreiheitsgrade ab, und die

Kerngestalt drückt sich jetzt allein durch die beiden Koordinaten a_0 und a_2 (oder durch β und γ) aus:

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0\left[1 + a_0 Y_{20} + a_2 (Y_{22} + Y_{2-2})\right]$$

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0\left[1 + a_0\sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1) + a_2\sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\sin^2\vartheta\cos 2\varphi\right] \qquad \text{(II.8)}$$

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0\left[1 + \beta\left[\sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}\cos\gamma\,(3\cos^2\vartheta - 1) + \sqrt{\tfrac{15}{16\pi}}\sin\gamma\sin^2\vartheta\cos 2\varphi\right]\right]$$

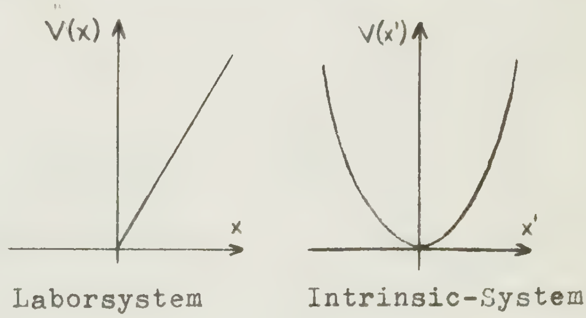
Desgleichen wird auch aus der potentiellen Energie durch den Übergang ins Intrinsic-System die räumliche Orientierung des Kerns entfernt und ihre Abhängigkeit von den inneren Koordinaten a_0 und a_2 offengelegt. Tragen wir a_0 und a_2 auf zwei senkrecht aufeinander stehenden Achsen auf, so wölbt sich über dieser a_0/a_2-Ebene die Fläche $V(a_0, a_2)$ des kollektiven Potentials, die, wie gezeigt wird, die wesentlichen Merkmale der Kernstruktur offenbart.

Die kollektive Potential-Fläche ist also definiert als die ins Intrinsic-System des Kerns transformierte potentielle Energie des Systems.

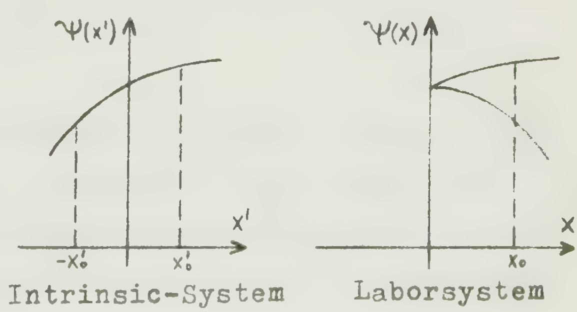
B. Symmetrie-Eigenschaften der kollektiven Potentialfläche

Bevor wir auf die Funktion der kollektiven Potentialfläche zu sprechen kommen, soll auf einige ihrer Besonderheiten aufmerksam gemacht werden. Es gibt insgesamt 24 Möglichkeiten, rechtshändige Koordinatensysteme in die Hauptachsen des Kerns zu legen: Zunächst darf man nämlich die z-Achse in 6 verschiedenen Richtungen anordnen, und für jede dieser Orientierungen kann man dann die x- und y-Achse viermal um je 90° um die z-Achse drehen derart, daß alle drei Achsen des Koordinatensystems auf den Hauptachsen des Kerns zu liegen kommen. Das Verschwinden der Deviationsmomente trifft für alle 24 Fälle zu, d.h. die Verfügung $a_1 = a_{-1} = 0$, $a_2 = a_{-2}$ zeichnet keines der 24 Koordinatensysteme aus, sondern umfaßt gleichzeitig alle. Mit anderen Worten: Die Transformation der 5 Laborkoordinaten $\alpha_{2\mu}$ auf die inneren Koordinaten a_0, a_2 und die 3 Eulerwinkel ist nicht umkehrbar eindeutig; vielmehr entsprechen 24 verschiedene Sätze von $a_0, a_2, \vartheta, \varphi, \psi$ ein- und demselben Satz $\alpha_{2\mu}$. Daraus ergeben sich zwei wichtige Konsequenzen, die wir zunächst an einem einfacheren Beispiel plausibel machen.

Sei x die Laborkoordinate, x′ die Intrinsic-Koordinate und $x = x'^2$ $(x > 0)$ die Transformationsgleichung. Der Zusammenhang zwischen den Koordinaten ist nicht umkehrbar eindeutig; zwei Werten von x′, die sich durch das Vorzeichen unterscheiden, entspricht der gleiche Wert x. Eine beliebige Funktion der Laborkoordinate x, etwa die Gerade $V(x)=2x$, wird beim Übergang ins Intrinsicsystem symmetrisch zur Ordinatenachse, hier die Parabel $V(x')=2x'^2$ (Fig.II.1). Wir sehen, daß allein durch den mehrdeutigen Charakter einer Transformation Symmetrien erzeugt werden (im Beispiel Spiegelsymmetrie). Alle für V existierenden Werte bekommt man, wenn man sich auf die x′-Werte einer der beiden Parabeläste beschränkt. Wir nehmen jetzt gemäß Fig.II.2 eine beliebige eindeutige Wellenfunk-



Figur II.1



Figur II.2

tion $\Psi(x')$ der Intrinsic-Koordinate. In unserem Beispiel ist $\Psi(x_0') \neq \Psi(-x_0')$. Da aber sowohl zu $-x_0'$ als auch zu x_0' die gleiche Laborkoordinate x_0 gehört, hat die Wellenfunktion $\Psi(x)$ an der Stelle x_0 des Laborsystems zwei Werte, ist nicht eindeutig und deshalb verboten. Zulässig sind folglich nur solche Wellenfunktionen der intrinsischen Koordinaten, die geeignet (hier zur Ordinatenachse) symmetrisiert sind.

Die beiden Resultate dieser kleinen Studie, die Erzeugung von Symmetrien in Funktionen der Intrinsic-Koordinaten einerseits und die Notwendigkeit von Symmetrisierungen der Wellenfunktionen andrerseits, sei auf unseren konkreten Fall übertragen:

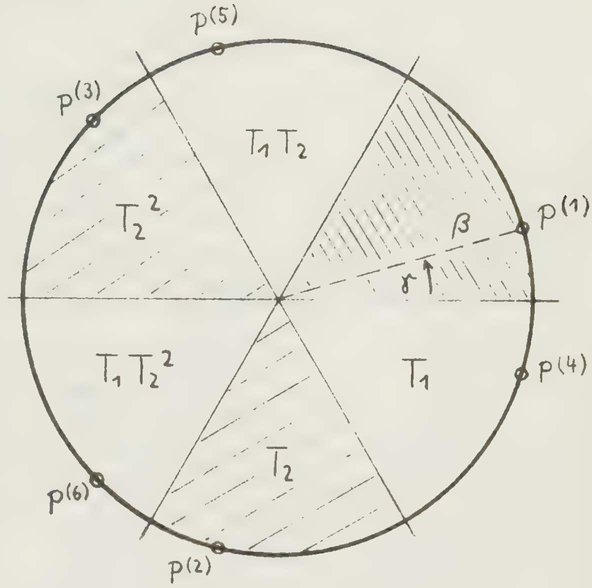
a) Die mehrdeutige Transformation gemäß $a_1 = a_{-1} = 0,\ a_2 = a_{-2}$ verursacht automatisch Symmetrien der kollektiven Potentialfläche. Die insgesamt 6 Symmetrietransformationen lassen sich auf zwei grundlegende zurückführen [23]. Durch β und γ ausgedrückt lauten diese:

$$T_1(\beta,\gamma) = (\beta,-\gamma) \quad , \quad T_1^2 = 1$$
$$T_2(\beta,\gamma) = (\beta,\gamma-\tfrac{2\pi}{3}) \quad , \quad T_2^3 = 1 \qquad \text{(II.9)}$$

Daraus lassen sich die 6 verschiedenen Symmetrietransformationen konstruieren:

$$\begin{aligned}
&(1) \quad 1\ (\beta,\gamma) = (\beta,\gamma)\\
&(2) \quad T_2\ (\beta,\gamma) = (\beta,\gamma-\tfrac{2\pi}{3})\\
&(3) \quad T_2^2\ (\beta,\gamma) = (\beta,\gamma-\tfrac{4\pi}{3})\\
&(4) \quad T_1\ (\beta,\gamma) = (\beta,-\gamma)\\
&(5) \quad T_1T_2\ (\beta,\gamma) = (\beta,-\gamma+\tfrac{2\pi}{3})\\
&(6) \quad T_1T_2^2(\beta,\gamma) = (\beta,-\gamma+\tfrac{4\pi}{3})
\end{aligned} \qquad \text{(II.10)}$$

Im Gegensatz zur a_0/a_2-Darstellung wirken sich die Symmetrietransformationen hier nur auf eine der beiden kollektiven Variablen, nämlich auf γ, aus. Da überhaupt alle Symmetrieeigenschaften der kollektiven Potential-Fläche in der β/γ-Darstellung übersichtlicher zutage treten, werden wir im folgenden stets diese bevorzugen.



Figur II.3

Es ist zweckmäßig, β und γ wie Polarkoordinaten in einer Ebene abzutragen, wobei β der Abstand eines Punktes vom Ursprung und γ der Winkel mit der Abszisse ist (Figur II.3). Die 6 Symmetrietransformationen zerschneiden diese β/γ-Ebene in 6 Sektoren von je 60°, von denen jeder für die Deutung der Kerneigenschaften ausreicht. Wir benutzen immer den stark schraffierten. Jeder Punkt dieses Sektors entspricht nach (II.8) einer Kerngestalt, und die Menge aller Punkte dieses Sektors entspricht umkehrbar eindeutig der Menge aller nur denkbaren quadrupoligen Deformationen.

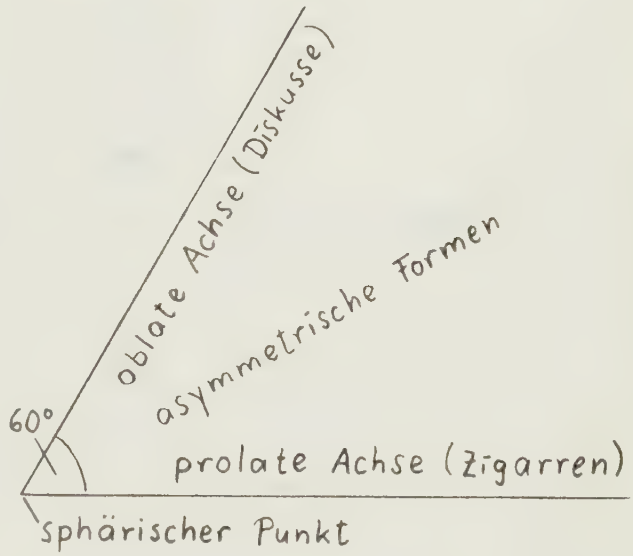
Figur II.3 zeigt weiterhin die Wirkung der 6 Symmetrietransformationen (II.10) auf den stark schraffierten Sektor insgesamt und auf einen speziellen Punkt $P^{(1)}$ aus diesem Sektor. Es sei wiederholt: die 6 Punkte $P^{(K)}$, also die 6 Paare $(\beta^{(K)}, \gamma^{(K)})$ der Intrinsic-Koordinaten definieren nach (II.8) alle die gleiche Kernform, sie gehören zu einem einzigen Satz $\alpha_{2\mu}$ der Laborkoordinaten, so daß jede im Laborsystem eindeutige Funktion notwendig an allen Stellen $P^{(K)}$ der β/γ-Ebene den gleichen Wert haben muß, insbesondere auch die kollektive Potentialfläche.

18 der weiter oben erwähnten 24 Symmetrien lassen β und γ invariant und ändern nur die Eulerwinkel. Sie bleiben deshalb in der β/γ-Ebene unsichtbar.

b) Die zweite Konsequenz aus der Mehrdeutigkeit der Transformation (II.6) ist für diese Arbeit belanglos, weil die Dynamik des Modells nur mit den Laborkoordinaten durchgeführt wird. Der Vollständigkeit halber sei aber nochmals erwähnt: Bei Verwendung der Koordinaten $\beta, \gamma, \vartheta, \varphi, \psi$ ist stets eine Symmetrisierung der Wellenfuktionen erforderlich, nicht etwa, weil der Kern diese Symmetrien besitzt, sondern einfach, um die Wellenfunktionen eindeutig bezüglich der Laborkoordinaten $\alpha_{2\mu}$ zu machen.

C. Funktion der kollektiven Potentialfläche

Figur II.4 gibt an, welche Gestalten der Kern nach (II.8) an den verschiedenen Punkten unseres β/γ-Sektors hat: Dem Ursprung entspricht die Kugel; zu den Punkten der prolate-Achse gehören achsialsymmetrische zigarrenförmige Kerngestalten; Punkte der oblate-Achse stellen ebenfalls achsialsymmetrische, diesmal aber diskusförmige, Gestalten dar; schließlich haben wir zwischen beiden Achsen die asymmetrischen Kernformen.

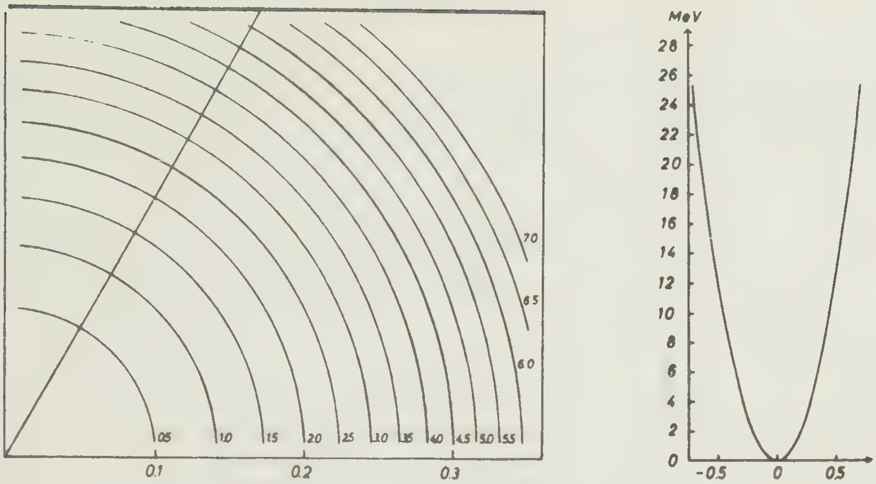


Figur II.4

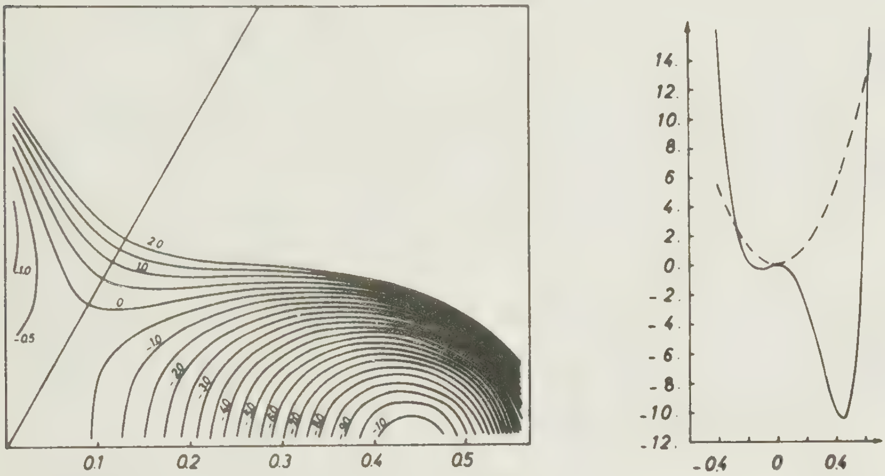
Mit den Koordinaten β und γ findet man sich schnell im 60°-Sektor zurecht und kann (ein weiterer Vorteil gegenüber a_0 und a_2) sogleich die zugehörige Kerngestalt abschätzen: β mißt die gesamte Deformation, und γ zeigt die Abweichungen von der Achsialsymmetrie an.

Beispiele für kollektive Potentialflächen einiger Kerntypen zeigen die Figuren II.5 bis II.8. Die Zahlen an den Höhenlinien durch die Punkte (β, γ) geben in MeV die potentielle Energie an, die ein Kern, der diese Fläche besitzt, für die durch β und γ festgelegten Kerngestalten hat. Alle Flächen sind auf 0 MeV für die Kugelform (d.h. im Ursprung) normiert, weil nur die Energieunterschiede für die kollektiven Eigenschaften maßgebend sind. In den Figuren sind außerdem die jeweiligen Schnitte der Fläche entlang der prolate- und oblate-Achse gezeichnet (bei Figur II.7 nur der Schnitt entlang $\gamma = 20^\circ$), die bei manchen Kernen schon die wesentlichen Informationen enthalten.

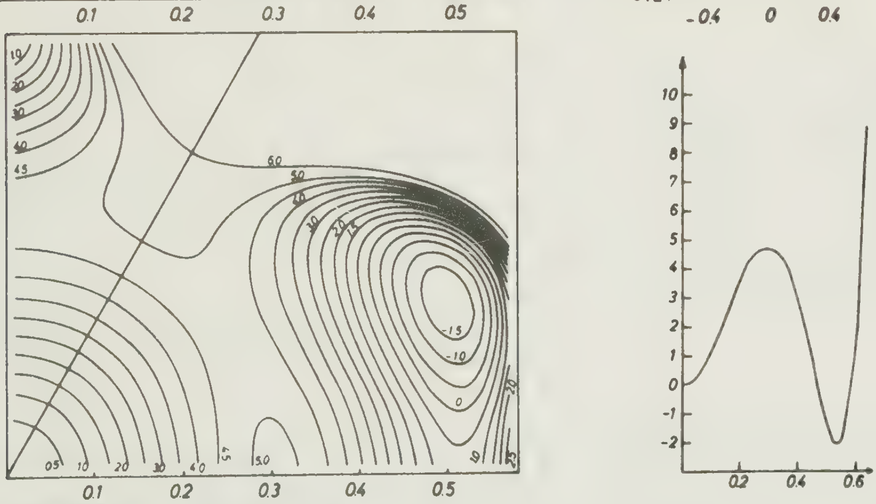
Daß die ausgewählten Flächen II.5 bis II.8 einen harmonischen Oszillator, einen achsialsymmetrisch deformierten prolaten Kern, einen asymmetrischen Kreisel und einen oblaten Kern darstellen, geht aus dem, was gesagt wurde, sofort hervor.



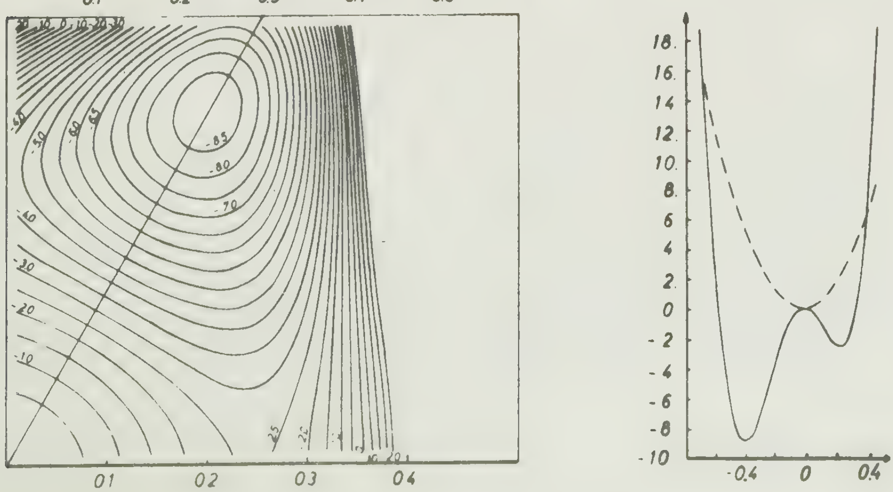
Figur II.5



Figur II.6



Figur II.7



Figur II.8

Durch die ersten drei dieser Spezialfälle werden im Rahmen unseres Modells gerade die wichtigsten der bisherigen Kollektivmodelle verwirklicht:

a) Kerne mit Massenzahlen zwischen 40 und 140 und zwischen 190 und 210 sah man als kugelförmig an (wie in Figur II.5) und deutete ihre untersten Energieniveaus durch das Vibrationsmodell [23] [24]. Danach vibrieren die Kerne harmonisch um ihre sphärische Gleichgewichtslage. Das Modell sagt das sogenannte harmonische Spektrum mit äquidistanten Niveau-Abständen voraus.

b) Kerne mit Massenzahlen zwischen 150 und 190 und größer als 220 betrachtet man als achsialsymmetrisch deformiert (wie in Fig.II.6) und erklärt ihre Spektren durch das Rotationsmodell [23] [24]. Dieses beschreibt die Rotationen eines fast starr deformierten Kerns. Das Modell liefert I(I+1)-Banden.

c) Davydow [25] bestritt die Achsialsymmetrie für die Kerne des in b) genannten Bereichs und beschrieb die Spektren stattdessen durch Rotationen asymmetrischer Kreisel (Figur II.7).

Kleine Abweichungen von den Grenzfällen der harmonischen Vibrationen und der reinen Rotationen wurden in zahlreichen Modellen durch Störungsrechnung oder Diagonalisierungen behandelt. Das wichtigste dieser Modelle ist das Rotations-Vibrations-Modell, mit dem Faessler und Greiner [26] [27] den Einfluß der Wechselwirkung zwischen den Vibrations- und Rotationsfreiheitsgraden in stark deformierten achsialsymmetrischen Kernen untersucht haben.

Da die Voraussagen der drei erwähnten Modelle die Experimente nur ungenügend wiedergeben (bei "sphärischen Kernen" ist die Übereinstimmung ausgesprochen schlecht), müssen wir vermuten, daß die meisten der in der Natur vorkommenden gg-Kerne zwischen diesen Extremfällen liegen. Wir unterlassen deshalb die Trennung aller Kerne in zwei Klassen, nämlich in sphärische und in deformierte, und wir verwerfen ihre theoretische Beschreibung durch ganz verschiedene Modelle. Vielmehr umfassen wir durch das Konzept der kollektiven Potentialfläche alle bisherigen Kollektivmodelle, beachten darüber hinaus die Kerne vom Übergangstyp

und behandeln Rotationen und Vibrationen auch in dynamischer Hinsicht (nächstes Kapitel) in völlig einheitlicher Weise. Besondere Aufmerksamkeit verdienen Misch-Typen, z.B. Kerne mit sphärischem Grundzustand, bei denen bei höherer Energie plötzlich Rotationsbanden einsetzen. Auch solche Eigentümlichkeiten sind in unserem Modell zu realisieren, etwa bei Verwendung einer kollektiven Potential-Fläche mit mehreren Minima, einem sphärischen Minimum und einem deformierten.

Welche Terme muß die kollektive Potentialfläche $V(\beta,\gamma)$ enthalten, um den eben aufgezählten Ansprüchen zu genügen, zu denen noch die Forderung nach Rotationsinvarianz des Potentials bezüglich des Laborsystems hinzukommt? Wie Noack [28] nachgewiesen hat, reichen zwei Bausteine L_2 und L_3, um jeden rotationsinvarianten aus den Kollektiv-Koordinaten $\alpha_{2\mu}$ bestehenden Ausdruck zu konstruieren:

$$L_2 = \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]}$$
$$L_3 = \left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \qquad \text{(II.11)}$$

Der Übergang ins Intrinsic-System ist leicht durchzuführen, indem man diese beiden Ausdrücke ausführlich (mit Clebsch-Gordan-Koeffizienten) hinschreibt und anschließend $\alpha_1 = \alpha_{-1} = 0$ und $\alpha_2 = \alpha_{-2}$ setzt. Das ergibt

$$I_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(a_0^2 + 2a_2^2\right) = \frac{1}{\sqrt{5}}\,\beta^2$$
$$I_3 = \sqrt{\frac{2}{35}}\,a_0\left(6a_2^2 - a_0^2\right) = -\sqrt{\frac{2}{35}}\,\beta^3\cos 3\gamma \qquad \text{(II.12)}$$

Nun zu den drei wichtigsten Bestandteilen der kollektiven Potentialfläche:

1) $C_2\, I_2 = C_2\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\,\beta^2\right)$

wird benötigt (und genügt andrerseits auch) zur Konstruktion harmonischer Oszillatoren. Man braucht nur $C_2 > 0$ zu wählen. Solche Potentiale sind γ-unabhängig.

2) $C_3\, I_3 = C_3 \left(-\sqrt{\frac{2}{35}}\, \beta^3 \cos 3\gamma\right)$

erzeugt prolate-oblate-Differenzen, also γ-Abhängigkeiten, der Fläche. Für $C_3 > 0$ wird die prolate Hälfte" ($0^\circ < \gamma < 30^\circ$) abgesenkt, die oblate ($30^\circ < \gamma < 60^\circ$) angehoben, für $C_3 < 0$ ist es umgekehrt. In Verbindung mit dem Term $C_2\, I_2$ lassen sich Minima auf der prolaten oder auch oblaten Achse konstruieren.

3) $C_6\, I_3^2 = C_6 \left(\frac{2}{35}\, \beta^6 \cos^2 3\gamma\right)$

Für $C_6 > 0$ wird die kollektive Potentialfläche bei $\gamma \neq 30^\circ$ angehoben, und zwar umso stärker, je näher den Achsen und je größer die Deformation β. Entlang $\gamma = 30^\circ$ entsteht ein Tal. Im Gegensatz dazu bildet sich für $C_6 < 0$ ein Wall bei $\gamma = 30^\circ$. Zusammen mit den beiden anderen besprochenen Termen ist es nun möglich, auch asymmetrische Minima wiederzugeben, die man mit dem Parameter C_3 aus der 30°-Lage in andere Positionen schieben kann.

Um weitere Feinheiten in der Fläche formen zu können, ergänzen wir das Potential durch die drei Terme $C_4\, I_2^2$, $D_6\, I_2^3$ (beide γ-unabhängig) und $C_5\, I_2 I_3$. Insgesamt lautet damit der Ausdruck für die kollektive Potentialfläche:

$$
\begin{aligned}
V(\beta,\gamma) = {} & C_2 \frac{1}{\sqrt{5}}\, \beta^2 - C_3 \sqrt{\frac{2}{35}}\, \beta^3 \cos 3\gamma + C_4\, \frac{1}{5}\, \beta^4 \\
& - C_5 \sqrt{\frac{2}{175}}\, \beta^5 \cos 3\gamma + C_6\, \frac{2}{35}\, \beta^6 \cos^2 3\gamma + D_6\, \frac{1}{5\sqrt{5}}\, \beta^6
\end{aligned}
\qquad \text{(II.13)}
$$

Im Laborsystem sieht das Potential $V(\alpha_{2\mu})$ also wie folgt aus:

$$
\begin{aligned}
V(\alpha_{2\mu}) = {} & C_2 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \\
& + C_3 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \\
& + C_4 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \\
& + C_5 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \\
& + C_6 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \\
& + D_6 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]}
\end{aligned}
\qquad \text{(II.14)}
$$

Weitere Terme bringen keinen bedeutsamen Gewinn mehr, sondern erschweren nur die Rechnungen. Der Term $C_7 I_2^2 I_3$ etwa bewirkt ähnliche Veränderungen der Fläche wie die Terme $C_3 I_3$ und $C_5 I_2 I_3$. Seine Belanglosigkeit fand auch U.Mosel bei seinen mikroskopischen Bestimmungen der kollektiven Potentialfläche bestätigt.

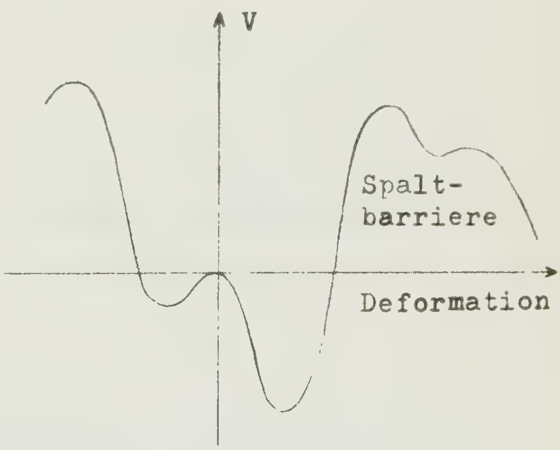
Die Funktion der kollektiven Potential-Fläche sei in drei Punkten umrissen:

i) Nur durch ihre Minima erfahren wir überhaupt, welche Kerngestalt wir vor uns haben, und umgekehrt können wir nur über die Fläche zu einem gewünschten Kern-Typ gelangen. Auch feinere Eigenschaften der Kernstruktur macht sie sichtbar: Die Tiefen der Minima sind ebenso Maß für die Stabilität der betreffenden Kerngestalt wie die Krümmungen der Fläche für die Härte und damit Energie von Vibrationen. Täler in der Fläche zeigen bevorzugte Gestaltsänderungen an, hohe Wälle zwischen zwei Minima deuten auf Isomere hin. Die exakte Bedeutung der durch die Fläche sichtbar gemachten Kerneigenschaften läßt sich jedoch immer erst durch Vergleich mit den Resultaten der Kerndynamik ermessen. So geben z.B. erst geeignete Übergangswahrscheinlichkeiten Aufschluß über die Durchlässigkeit von Barrieren und lassen erst die Kernradien innerhalb einer Rotationsbande die Weichheit einer Kerngestalt in Zahlen fassen. Aber ohne diese Bilder, hier "Barriere" und "Weichheit", die die Fläche hervorbringt, blieben alle Ergebnisse der Dynamik unverstanden. Konkrete Fälle werden im Kapitel III diskutiert.
   Indem wir die Dynamik mittels der kollektiven Potential-Fläche durch die Merkmale der Kernstruktur verstehen und deuten lernen, werden wir auch zunehmend fähig, vom Experiment, also von vorgegebenen dynamischen Größen, auf die Beschaffenheit des Kerns zu schließen. Das Bild vom Kern, das wir uns so auf Grund der Experimente machen, werden wir wiederum in einer kollektiven Potential-Fläche zusammenfassen und anschließend die zugehörige Schrödinger-Gleichung lösen. Beim Vergleich der erhaltenen theoretischen Ergebnisse mit dem Experiment stellt sich heraus, wie genau der Kern durch die Fläche erklärt wird. Die neu gewonnene Information weist dann wieder die Richtung, in der die Fläche verbessert werden muß,usw.

Damit ist der Prozeß beschrieben, in dem wir schrittweise unsere Kenntnis vom Kern erweitern wollen.

ii) Die kollektive Potential-Fläche stellt den Anschluß zu mikroskopischen Theorien des Kerns her. U.Mosel entwickelte ein Verfahren [1], das genau auf die Form (II.13) und (II.14) des kollektiven Potentials führt. Mittels Nilsson-Modell plus Paarkraft plus Coulombenergie bestimmt er das Potential an beliebigen gewünschten Punkten der β/γ-Ebene und ermittelt schließlich durch least-square-fit die Parameter C_ν des Potential-Ansatzes. Details sind in den zitierten Schriften nachzulesen. In enger Zusammenarbeit mit Mosel wird versucht, die kollektiven Kerneffekte in zwei Schritten auf die einzelnen Nukleonen zurückzuführen: Zunächst wird die kollektive Potential-Fläche für spezielle Kerne mikroskopisch bestimmt und anschließend die Spektren, Übergangswahrscheinlichkeiten und Radien mit dem Modell, von dem diese Arbeit handelt, berechnet. Nicht nur wird bei diesem Verfahren eine befriedigende Erklärung der Kerneigenschaften erreicht, sondern durch Vergleich mit dem Experiment prüft man rückwärts auch die Annahmen, die in die mikroskopische Theorie eingehen. Die Rechnungen sind noch nicht abgeschlossen; deshalb werden nur wenige vorläufige Ergebnisse in diese Arbeit aufgenommen.

iii) Bisher schnitten wir die kollektive Potential-Fläche bei Deformationen von etwa β=0.4 bis 0.5 ab, und in der Tat ist nur diese beschränkte Region für die Vorgänge im niederenergetischen Bereich der Kerne verantwortlich. Aber natürlich hört die Fläche bei diesen Deformationen nicht auf. In Fig.II.9 ist der prolate-oblate-Schnitt durch die kollektive Potential-Fläche über den weiteren Bereich angegeben, und man bemerkt sofort, daß das Gebiet großer Deformationen für die Kernspaltung (für Höhe und Gestalt der Spaltbarrieren) maßgebend ist [29] [30] [31] .



Figur II.9

Kapitel III

DYNAMIK DES MODELLS

A. Grundlagen

Unser Ziel, die Dynamik der gg-Kerne aufzuklären, suchen wir nicht über Wirkungsquerschnitte sondern direkt zu erreichen, indem wir Energiespektren berechnen, Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten bestimmen sowie mittlere quadratische Radien ermitteln und die Resultate mit dem Experiment vergleichen. Das dazu dienende kollektive Kernmodell sei an Hand einzelner Punkte charakterisiert.

(1) Geeignete kollektive Variablen $\alpha_{2\mu}$ gewinnen wir aus der Entwicklung der Kernoberfläche nach Kugelfunktionen:

$$R(\vartheta,\varphi) = R_0 \left(1 + \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} (-)^{\mu} Y_{2-\mu}\right) \tag{III.1}$$

Diese kollektiven Variablen beziehen sich somit auf das Schwerpunktsystem des Kerns; aber da wir dieses als ruhend ansehen können, werden wir die $\alpha_{2\mu}$ stets Labor-Koordinaten nennen. Sie bilden, wie im Abschnitt I.F. diskutiert, den kovarianten irreduziblen Tensor $\alpha^{[2]}$ und haben die zusätzliche Eigenschaft

$$(-)^{\mu} \alpha_{2-\mu} = \alpha_{2\mu}^{*}$$

(2) Bei der Konstruktion unseres Hamilton-Operators lassen wir uns leiten von der Diskussion der kollektiven Potential-Fläche im Abschnitt II.C. und von dem zur Verfügung stehenden mathematischen Apparat (Abschnitte I.D.E.G.). Einerseits soll der Hamilton-Operator die Darstellung aller wichtigen Kerntypen gewährleisten und andrerseits soll er sich mathematisch möglichst einfach hand-

haben lassen. Aus diesen Überlegungen resultiert der Ansatz:

$$
\begin{aligned}
H = {} & P_2 \left[\pi^{[2]} \times \pi^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + P_3 \left[\left[\pi^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \pi^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + C_2 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + C_3 \left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + C_4 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + C_5 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + C_6 \left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \\
& + D_6 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]}
\end{aligned}
\qquad \text{(III.2)}
$$

Nach Konstruktion verletzt dieser Hamilton-Operator keinerlei Invarianzen. Die äußerliche Gestalt einer Potenzreihe besagt nicht etwa, daß im wesentlichen ein harmonischer Oszillator vorliegt, bei dem kleinere "Anharmonizitäten" bis zur 6.Ordnung berücksichtigt werden, vielmehr rührt diese Gestalt von der Absicht her, die mathematischen Schwierigkeiten herabzusetzen. Nur Matrixelemente von Termen mit niedrigen Potenzen von $\alpha_{2\mu}$ lassen sich nämlich mit vertretbarem Aufwand auf die bereits nach Abschnitt I.E. ermittelten reduzierten Matrixelemente der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren β_μ^+ und β_μ zurückführen.

(3) Wir beschränken uns, wie man am Hamilton-Operator erkennt, auf die wichtigsten Deformationsmöglichkeiten des Kerns, die Quadrupol-Deformationen, und behandeln diese Bewegung adiabatisch, d.h. wir vernachlässigen die Wechselwirkung mit anderen, höher liegenden, Bewegungsarten, etwa Teilchen- und Quasiteilchen-Anregungen, Oktupol-Deformationen und Riesenresonanzen. Dagegen begnügen wir uns nicht mit der harmonischen Näherung für die kinetische Energie, sondern haben auch einen anharmonischen Term eingebaut.

(4) Wir vermeiden die strenge Einteilung in sphärische und deformierte Kerne und ihre theoretische Untersuchung durch ganz verschiedene Modelle. Unser Hamilton-Operator schließt alle speziellen Fälle ein. Durch passende Wahl des kollektiven Potentials können wir sowohl sphärische Kerne mit harmonischen oder anharmonischen Vibrationen als auch achsialsymmetrisch oder asymmetrisch deformierte Kerne verwirklichen, dazu alle Typen von Übergangskernen.

(5) Der Quadrupolbewegung werden keinerlei Einschränkungen, wie etwa Harmonizität der Vibrationen, auferlegt; keine Näherung engt das Wechselspiel der verschiedenen Freiheitsgrade ein; die Wechselwirkung zwischen Rotationen und Vibrationen und auch die zwischen β - und γ -Vibrationen werden exakt berücksichtigt.

(6) Es sei betont, daß die gesamte Dynamik des Kerns, d.h. die Berechnung von Energie-Niveaus, Wellenfunktionen, Übergangswahrscheinlichkeiten und Radien, ausschließlich mit den Laborkoordinaten $\alpha_{2\mu}$ durchgeführt wird. Dadurch entfällt die künstliche Aufspaltung des kollektiven Hamilton-Operators in einen Vibrations- und einen Rotationsanteil, die man bei Modellen deformierter Kerne bisher stets vornahm.

(7) Zum Zwecke der physikalischen Deutung unserer Resultate transformieren wir die potentielle Energie $V(\alpha_{2\mu})$ in das Intrinsic-System des Kerns mit den Koordinaten β und γ ; denn an $V(\beta,\gamma)$, der kollektiven Potential-Fläche, können wir, wie im Abschnitt II.C. erläutert, die entscheidenden Struktur-Merkmale der Kerne ablesen. Durch ständigen Vergleich der berechneten Energiespektren, Übergangswahrscheinlichkeiten und Radien mit der kollektiven Potential-Fläche wollen wir herausfinden, wie wir die Konstellationen der dynamischen Größen und die Eigenheiten der Fläche (und damit des Kerns) einander zuzuordnen haben. Das endgültige Ziel, für das in dieser Arbeit die Vorarbeit geleistet wird, soll sein, die kollektive Potentialfläche für alle gg-Kerne zu erstellen,

um damit das Wesentliche, was wir über die kollektive Struktur der Atomkerne erfahren können, übersichtlich und anschaulich zu machen.

(8) Wir diagonalisieren den Hamilton-Operator getrennt für jeden der Drehimpulse 0^+, 2^+, 3^+, 4^+, 5^+ und 6^+, wobei wir die Eigenfunktionen eines fünf-dimensionalen harmonischen Oszillators als Basis verwenden. Diese Oszillator-Funktionen berücksichtigen wir bis hin zu einer Phononenzahl von N=33 (auf Grund der verfügbaren Speicherplätze des benutzten Computers erreichen wir für die 6^+-Niveaus nur N=30). Die Matrizen haben dann Größen von 108, 198, 91, 272, 165 und 271 für die niedrigsten sechs Drehimpulse.

(9) Die Schwierigkeiten bei der Klassifizierung der Basis-Funktionen und bei der Berechnung der Matrixelemente wurden mit den gruppentheoretischen Methoden des Kapitels I. überwunden, wobei wir uns hauptsächlich auf die Veröffentlichungen von Hecht [12] , Le Tourneux [14] und von Weber et.al. [15] [20] stützten.

(10) Konvergenz und Genauigkeit unserer Methode haben sich, wie in einem folgenden Abschnitt noch nachgewiesen wird, als ausgezeichnet herausgestellt, sogar in stark deformierten Kernen. Die durchschnittliche Rechenzeit für ein komplettes Spektrum beträgt sechs bis sieben Minuten auf einem Univac 1108-Computer.

B. Quantisierung

Der Ansatz (III.2) für den Hamilton-Operator ist formuliert mit den Koordinaten und den dazu kanonisch konjugierten Impulsen, genauer: nicht die kanonischen Impulse $\pi_{2\mu}$ selbst, die den kontravarianten Tensor $\pi^{(2)}$ bilden, sondern der kovariante Tensor $\pi^{[2]}$ und seine Komponenten $\pi^{[2]}_{\mu} = (-)^{\mu}\pi_{2-\mu}$ mußten aus den im Abschnitt I.F. dargelegten Gründen genommen werden.
Die Ableitung von (III.2) aus einer mit den Geschwindigkeiten ausgedrückten Fassung, wie es Kishimoto und Ikeda [32] getan haben, ist hier überflüssig, da $\mathcal{P}_2$ und $\mathcal{P}_3$ vorerst freie Parameter sind. Für die harmonische Näherung der kinetischen Energie gelten einfache Zusammenhänge:

$$T = B_2\left[\dot{\alpha}^{[2]} \times \dot{\alpha}^{[2]}\right]^{[0]} = \mathcal{P}_2\left[\pi^{[2]} \times \pi^{[2]}\right]^{[0]} \quad \text{mit} \quad \mathcal{P}_2 = \frac{5}{4B_2} \tag{III.3}$$

$$\dot{\alpha}_{2\mu} = \frac{\sqrt{5}}{2}\frac{1}{B_2}(-)^{\mu}\pi_{2-\mu} = \frac{\sqrt{5}}{2}\frac{1}{B_2}\pi^{[2]}_{\mu} \tag{III.4}$$

Auch wenn der anharmonische Term der kinetischen Energie eingeschaltet ist, werden wir später statt $\mathcal{P}_2$ oft den Parameter $\mathcal{B}_2 = 5/4\mathcal{P}_2$ anführen, obwohl ansonsten kompliziertere Relationen als (III.3) und (III.4) zutreffen.

Die kanonische Quantisierung des Systems lautet wie immer

$$\begin{aligned} \left[\alpha_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}\right] &= \left[\pi_{2\mu}, \pi_{2\mu'}\right] = 0 \\ \left[\pi_{2\mu}, \alpha_{2\mu'}\right] &= \frac{\hbar}{i}\delta_{\mu\mu'} \end{aligned} \tag{III.5}$$

Für Koordinaten und Impulse setzen wir an:

$$\begin{aligned} \alpha_{2\mu} &= \frac{1}{2}\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}}\left(\beta^{+}_{\mu} + (-)^{\mu}\beta_{-\mu}\right) \\ \pi_{2\mu} &= -i\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}}\left(\beta_{\mu} - (-)^{\mu}\beta^{+}_{-\mu}\right) \end{aligned} \tag{III.6}$$

Aus der zweiten Gleichung folgt

$$\Pi_{\mu}^{[2]} = (-)^{\mu}\, \Pi_{2-\mu} = i\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}}\; \left(\beta_{\mu}^{+} - (-)^{\mu}\, \beta_{-\mu}\right) \qquad \text{(III.7)}$$

Speziell für Systeme ohne anharmonische kinetische Terme gilt wegen (III.4)

$$\dot{\alpha}_{2\mu} = \frac{i}{2B_2}\sqrt{\hbar\sqrt{5B_2' C_2'}}\; \left(\beta_{\mu}^{+} - (-)^{\mu}\, \beta_{-\mu}\right) \qquad \text{(III.8)}$$

Der Ansatz (III.6) ist zusammen mit (III.5) identisch mit der Quantisierung (I.102) und (I.98) des harmonischen Oszillators

$$H' = B_2' \left[\dot{\alpha}^{[2]} \times \dot{\alpha}^{[2]}\right]^{[0]} + C_2' \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \qquad \text{(III.9)}$$

Aus Abschnitt I.F. übernehmen wir sofort das weitere: β_{μ}^{+} und β_{μ} genügen den Bosonen-Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \left[\beta_{\mu}, \beta_{\mu'}\right] &= \left[\beta_{\mu}^{+}, \beta_{\mu'}^{+}\right] = 0 \\ \left[\beta_{\mu}, \beta_{\mu'}^{+}\right] &= \delta_{\mu\mu'} \end{aligned} \qquad \text{(III.10)}$$

und stellen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Oszillatorquanten (Phononen) dar. Der Spin dieser Phononen ist 2, weil die β_{μ}^{+} einen Tensor 2.Ordnung bezüglich Raumdrehungen bilden, und ihre Energie ist $\hbar\sqrt{C_2'/B_2'}$, was sich unmittelbar aus der Form (I.106) des Oszillators ergibt:

$$H' = \hbar\sqrt{\frac{C_2'}{B_2'}}\left(N + \frac{5}{2}\right)$$

Einsetzen von (III.6) bzw. (III.7) in (III.2) liefert den Hamilton-Operator ausgedrückt durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, deren Wirkung auf die Oszillator-Wellenfunktionen $|[N]v\ell\alpha m\rangle$ aus den Abschnitten I.E. und I.G. bekannt ist, d.h. auf Grund des Ansatzes (III.6) gelingt es, die Matrixelemente des Hamilton-Operators in der Basis des Oszillators (III.9) zu berechnen.

Über die Krümmung der Basis-Parabel $C_2' \frac{1}{\sqrt{5}} \beta^2$, die durch C_2' bestimmt ist (großes C_2' bewirkt große Krümmung) und über den Massenparameter B_2' können wir frei verfügen. Die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamilton-Operators sind natürlich unabhängig von der verwendeten Basis, aber immerhin können wir durch geeignete Basiswahl die Konvergenz der Diagonalisierung verbessern, das heißt hier, die Anzahl der benötigten Basisfunktionen herabsetzen.

(III.6) lehrt, daß die Oszillator-Funktionen und damit die Matrixelemente nur vom Produkt $B_2' C_2'$ abhängen, was einige Merkwürdigkeiten hervorbringt:

Man kann sich auf ein beliebiges festes B_2' beschränken und trotzdem durch geeignete Parabelweiten alle möglichen Sätze von Eigenfunktionen eines 5-dimensionalen harmonischen Oszillators (III.9) bekommen. Desgleichen liefern eine weit geöffnete und eine sehr schmale Parabel identische Sätze von Wellenfunktionen, wenn nur B_2' so gewählt ist, daß die Produkte $B_2' C_2'$ für beide Oszillatoren gleich sind.

Da andrerseits die Energie eines Phonons nur vom Quotienten C_2'/B_2' abhängt, kann man auch sagen: Für einen vorgegebenen Satz von Wellenfunktionen (festes Produkt $B_2' C_2'$) läßt sich die Energie der Phononen beliebig groß oder klein machen, ohne daß dies die Matrixelemente beeinflussen könnte. Umgekehrt kann man alle denkbaren Sätze von Basisfunktionen konstruieren, ohne die Energie der Oszillator-Quanten zu ändern.

C. Energien und Wellenfuktionen

Energien und Wellenfunktionen sind das Resultat der Diagonalisierung des Hamilton-Operators mit den (geringfügig abgeänderten) Programmen TRIDI, VALEIG und VECEIG. Wir stellen zu diesem Zweck die Energiematrix in der Oszillator-Basis $|[N]v\ell\alpha m\rangle$ auf. Für diese Basis, die im Abschnitt I.D. klassifiziert wurde, sind die Matrixelemente der grundlegenden Operatoren bereits bestimmt. Im folgenden führen wir die Matrixelemente aller 8 Terme des Hamilton-Operators auf die reduzierten Matrixelemente von β^+_μ und $(-)^\mu\beta_{-\mu}$ (bekannt aus Abschnitt I.E.) und auf die Matrixelemente der 3 speziellen Operatoren (I.107) (berechnet im Abschnitt I.G.) zurück. Wegen seines skalaren Charakters hat der Hamilton-Operator nur Matrixelemente zwischen Basis-Zuständen gleichen Drehimpulses, so daß die Energiematrizen für verschiedene Drehimpulse getrennt diagonalisiert werden können. Da kein äußeres Feld die Kugelsymmetrie des Systems stört, hängen die Energien, also auch die Matrixelemente, nicht von der magnetischen Quantenzahl m ab.

1) $\underline{P_2\,[\pi^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}}$

$$\langle[N']v'\ell\alpha'm|P_2\,[\pi^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle =$$
$$P_2\left(-\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}\right)\langle[N']v'\ell\alpha'm|[\beta^+\times\beta^+]^{[0]}-[\beta^+\times\beta]^{[0]}-[\beta\times\beta^+]^{[0]}+[\beta\times\beta]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle$$

Wegen der Auswahlregeln (I.108) gilt

$$N' = N+2, N, N-2 \text{ und } v' = v,\ l' = l,\ \alpha' = \alpha\ ,\ m' = m$$

Die Matrixelemente dieser 3 Fälle folgen aus (I.118),(I.119),(I.121):

$$\langle[N+2]v\ell\alpha m|P_2\,[\pi^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle = P_2\left(-\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}\right)\sqrt{\frac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5)}$$
$$\langle[N]v\ell\alpha m|P_2\,[\pi^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle = P_2\left(-\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}\right)\left[-\frac{1}{\sqrt{5}}\,(2N+5)\right] \qquad \text{(III.11)}$$
$$\langle[N-2]v\ell\alpha m|P_2\,[\pi^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle = P_2\left(-\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}\right)\sqrt{\frac{1}{5}(N-v)(N+v+3)}$$

2) $\underline{P_3\,[\pi^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}}$

$$\langle[N']v'\ell\alpha'm|P_3\,[\pi^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle =$$
$$P_3\,(-)^{\ell-m}\begin{pmatrix}\ell & 0 & \ell\\ -m & 0 & m\end{pmatrix}\langle[N']v'\ell\alpha'\|[\pi^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\pi^{[2]}]^{[0]}\|[N]v\ell\alpha\rangle =$$

$$P_3 \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \sum_{N'''v'''\ell'''\alpha'''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ \ell & \ell & \ell''' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| [\pi^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[2]} \| [N''']v'''\ell'''\alpha''' \rangle \langle [N''']v'''\ell'''\alpha''' \| \pi^{[2]} \| [N]v\ell\alpha \rangle$$

$$P_3 (-)^{\ell} \sqrt{\frac{5}{2\ell+1}} \sum_{\substack{N''v''\ell''\alpha'' \\ N'''v'''\ell'''\alpha'''}} (-)^{\ell'''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ \ell & \ell & \ell''' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell''' & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \pi^{[2]} \| [N'']v''\ell''\alpha'' \rangle \cdot$$
$$\langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \alpha^{[2]} \| [N''']v'''\ell'''\alpha''' \rangle \langle [N''']v'''\ell'''\alpha''' \| \pi^{[2]} \| [N]v\ell\alpha \rangle$$

$$P_3 \left(-\frac{\hbar}{2}\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}}\right) \frac{1}{2\ell+1} \sum_{\substack{N''v''\ell''\alpha'' \\ N'''v'''\ell'''\alpha'''}} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell'' & \ell''' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta^+ - \beta \| [N'']v''\ell''\alpha'' \rangle \cdot \qquad \text{(III.12)}$$
$$\langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta^+ + \beta \| [N''']v'''\ell'''\alpha''' \rangle \langle [N''']v'''\ell'''\alpha''' \| \beta^+ - \beta \| [N]v\ell\alpha \rangle$$

Ausgehend von der letzten Zeile haben wir die Summationen über N'', v'', N''', v''' für die 16 möglichen Fälle

$N' = N+3, N+1, N-1, N-3$ mit jeweils $v' = v+3, v+1, v-1, v-3$

per Hand erledigt und anschließend die reduzierten Matrixelemente mit den Formeln (I.80) auf solche mit $N' = v'$ und $N = v$ zurückgeführt. Nur für einen einzigen der 16 Fälle sei das Ergebnis als Beispiel hingeschrieben:

$N' = N+1, \; v' = v+1$

$$\langle [N+1]v+1\,\ell\alpha'm \,|\, P_3 [\pi^{[2]} \times \alpha^{[2]} \times \pi^{[2]}]^{[0]} \,|\, [N]v\ell\alpha m \rangle =$$

$$P_3 \left(-\frac{\hbar}{2}\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{B_2'C_2'}{5}}}\right) \frac{1}{2\ell+1} \sqrt{\frac{N+v+5}{2v+5}} \sum_{\ell''\alpha''\ell'''\alpha'''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell'' & \ell''' \end{Bmatrix}$$

$$\Big[-\frac{N+v+7}{2v+7} \langle [v+1]v+1\,\ell\alpha' \| \beta \| [v+2]v+2\,\ell''\alpha'' \rangle \langle [v+2]v+2\,\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [v+1]v+1\,\ell'''\alpha''' \rangle \langle [v+1]v+1\,\ell'''\alpha''' \| \beta^+ \| [v]v\ell\alpha \rangle$$
$$- \frac{N-3v-3}{2v+5} \langle [v+1]v+1\,\ell\alpha' \| \beta^+ \| [v]v\,\ell''\alpha'' \rangle \langle [v]v\,\ell''\alpha'' \| \beta \| [v+1]v+1\,\ell'''\alpha''' \rangle \langle [v+1]v+1\,\ell'''\alpha''' \| \beta^+ \| [v]v\ell\alpha \rangle$$
$$- \frac{N+v+3}{2v+3} \langle [v+1]v+1\,\ell\alpha' \| \beta^+ \| [v]v\,\ell''\alpha'' \rangle \langle [v]v\,\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [v-1]v-1\,\ell'''\alpha''' \rangle \langle [v-1]v-1\,\ell'''\alpha''' \| \beta \| [v]v\ell\alpha \rangle \Big]$$

Erst die so präparierten Matrixelemente wurden programmiert.

3) $C_2 [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]}$

$$\langle [N']v'\ell\alpha'm \,|\, C_2 [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} \,|\, [N]v\ell\alpha m \rangle$$

$$C_2 \left(\frac{1}{4}\hbar\sqrt{\frac{5}{B_2'C_2'}}\right) \langle [N']v'\ell\alpha'm \,|\, [\beta^+ \times \beta^+]^{[0]} + [\beta^+ \times \beta]^{[0]} + [\beta \times \beta^+]^{[0]} + [\beta \times \beta]^{[0]} \,|\, [N]v\ell\alpha m \rangle$$

Genau wie unter 1) bleiben bezüglich der möglichen Quantenzahlen nur drei Fälle übrig:

$$\langle [N+2]v\ell\alpha m|C_2[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle = C_2\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)\sqrt{\frac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5)}$$
$$\langle [N]v\ell\alpha m|C_2[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle = C_2\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)\left[\frac{1}{\sqrt{5}}(2N+5)\right] \tag{III.13}$$
$$\langle [N-2]v\ell\alpha m|C_2[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle\ C_2\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)\sqrt{\frac{1}{5}(N-v)(N+v+3)}$$

Diese Matrixelemente hängen in gleicher Weise von den Quantenzahlen ab wie bei 1) und unterscheiden sich nur durch Konstanten. Man könnte deshalb die Matrixelemente der beiden harmonischen Terme zusammenfassen.

4) $\underline{C_3[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}}$

$$\langle [N']v'\ell\alpha'm|C_3[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle =$$
$$C_3(-)^{\ell-m}\begin{pmatrix}\ell & 0 & \ell\\ -m & 0 & m\end{pmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha'\|[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\|[N]v\ell\alpha\rangle =$$
$$C_3\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\sum_{N'''v'''\ell'''\alpha'''}\begin{Bmatrix}2 & 2 & 0\\ \ell & \ell & \ell'''\end{Bmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha'\|[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[2]}\|[N''']v'''\ell'''\alpha'''\rangle\langle [N''']v'''\ell'''\alpha'''\|\alpha^{[2]}\|[N]v\ell\alpha\rangle =$$
$$C_3(-)^{\ell}\sqrt{\frac{5}{2\ell+1}}\sum_{\substack{N''v''\alpha''\ell''\\ N'''v'''\alpha'''\ell'''}}(-)^{\ell'''}\begin{Bmatrix}2 & 2 & 0\\ \ell & \ell & \ell'''\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}2 & 2 & 2\\ \ell & \ell'' & \ell'''\end{Bmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha'\|\alpha^{[2]}\|[N'']v''\ell''\alpha''\rangle\cdot$$
$$\langle [N'']v''\ell''\alpha''\|\alpha^{[2]}\|[N''']v'''\ell'''\alpha'''\rangle\langle [N''']v'''\ell'''\alpha'''\|\alpha^{[2]}\|[N]v\ell\alpha\rangle =$$

$$C_3\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^{3/2}\frac{1}{2\ell+1}\sum_{\substack{N''v''\ell''\alpha''\\ N'''v'''\ell'''\alpha'''}}\begin{Bmatrix}2 & 2 & 2\\ \ell & \ell'' & \ell'''\end{Bmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha'\|\beta^++\beta\|[N'']v''\ell''\alpha''\rangle\cdot \tag{III.14}$$
$$\langle [N'']v''\ell''\alpha''\|\beta^++\beta\|[N''']v'''\ell'''\alpha'''\rangle\langle [N''']v'''\ell'''\alpha'''\|\beta^++\beta\|[N]v\ell\alpha\rangle$$

Bezüglich der möglichen Quantenzahlen N' und v' (bei vorgegebenen N und v) treten wieder dieselben Fälle wie unter 2) auf. Auch hier sei der Fall $N' = N+1$, $v' = v+1$ nach der Summation über N'', v'', N''', v''' und nach Benutzung von (I.80) angegeben:

$$\langle [N+1]v+1\,\ell\alpha'm|C_3[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}|[N]v\ell\alpha m\rangle =$$
$$C_3\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^{3/2}\frac{1}{2\ell+1}(3N-v+7)\sqrt{\frac{N+v+5}{2v+5}}\sum_{\ell''\alpha''\ell'''\alpha'''}\begin{Bmatrix}2 & 2 & 2\\ \ell & \ell'' & \ell'''\end{Bmatrix}$$
$$\Big[\frac{1}{2v+7}\langle [v+1]v+1\,\ell\alpha'\|\beta\|[v+2]v+2\,\ell''\alpha''\rangle\langle [v+2]v+2\,\ell''\alpha''\|\beta^+\|[v+1]v+1\,\ell'''\alpha'''\rangle\langle [v+1]v+1\,\ell'''\alpha'''\|\beta^+\|[v]v\ell\alpha\rangle$$
$$\frac{1}{2v+5}\langle [v+1]v+1\,\ell\alpha'\|\beta^+\|[v]v\ell''\alpha''\rangle\langle [v]v\ell''\alpha''\|\beta\|[v+1]v+1\,\ell'''\alpha'''\rangle\langle [v+1]v+1\,\ell'''\alpha'''\|\beta^+\|[v]v\ell\alpha\rangle$$
$$\frac{1}{2v+3}\langle [v+1]v+1\,\ell\alpha'\|\beta^+\|[v]v\ell''\alpha''\rangle\langle [v]v\ell''\alpha''\|\beta^+\|[v-1]v-1\,\ell'''\alpha'''\rangle\langle [v-1]v-1\,\ell'''\alpha'''\|\beta\|[v]v\ell\alpha\rangle\Big]$$

Auf einige Zusammenhänge zwischen den Matrixelementen von 2) und 4) sei noch hingewiesen:

Der Vergleich von (III.12) und (III.14) lehrt, daß sich die Matrixelemente der beiden Dreierterme in den 8 Fällen

$$N' = N+3, N-3 \text{ mit } v' = v+3, v+1, v-1, v-3$$

nur um einen konstanten (von den Quantenzahlen unabhängigen) Faktor unterscheiden.

Statt $\mathcal{P}_3 \left[-\frac{\hbar}{2} \sqrt{\hbar \sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}} \right]$ bei der kinetischen Energie

steht $C_3 \left[\frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}} \right]^{3/2}$ bei der potentiellen Energie.

Vergleicht man die 8 restlichen Fälle nach der Summation über N'', v'', N''' und v''', so findet man weitere 4 Fälle, nämlich

$$N' = N+1 \text{ mit } v' = v+3, v-3 \quad \text{und} \quad N' = N-1 \text{ mit } v' = v+3, v-3,$$

bei denen die Matrixelemente nur um einen festen Faktor verschieden sind.

Statt $\mathcal{P}_3 \left[-\frac{\hbar}{2} \sqrt{\hbar \sqrt{\frac{B_2' C_2'}{5}}} \right]$ bei der kinetischen Energie

steht $-3\, C_3 \left[\frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}} \right]^{3/2}$ bei der potentiellen Energie.

Die übrigen 4 Fälle

$$N' = N+1 \text{ mit } v' = v+1, v-1 \quad \text{und} \quad N' = N-1 \text{ mit } v' = v+1, v-1$$

treten nur für die Drehimpulse 2,4,5,6 auf, da es nach (I.40) keine Paare von 0^+- oder 3^+-Zuständen mit $\Delta v = \pm 1$ gibt.

5) $C_4 \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]} \right]^{[0]}$

Die Matrixelemente dieses Terms sind leicht auf die unter 3) berechneten zurückzuführen:

$$\langle [N']v'\ell\alpha' m | C_4 [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle =$$

$$C_4(-)^{\ell-m}\begin{pmatrix}\ell & 0 & \ell\\ -m & 0 & m\end{pmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N]v\ell\alpha\rangle =$$

$$C_4(-)^{\ell-m}\begin{pmatrix}\ell & 0 & \ell\\ -m & 0 & m\end{pmatrix}\sum_{N''v''\ell''\alpha''}\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ \ell & \ell & \ell''\end{Bmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle\langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N]v\ell\alpha\rangle$$

$$C_4(-)^{\ell-m}\begin{pmatrix}\ell & 0 & \ell\\ -m & 0 & m\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ \ell & \ell & \ell\end{Bmatrix}\sum_{N''v''\alpha''}\langle [N']v'\ell\alpha' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N'']v''\ell\alpha''\rangle\langle [N'']v''\ell\alpha'' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N]v\ell\alpha\rangle$$

$$C_4\sum_{N''}\langle [N']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'']v\ell\alpha m\rangle\langle [N'']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle \delta_{vv'}\delta_{\alpha\alpha'}$$

Auf Grund der Auswahlregeln fielen die Summationen über v'', l'', α'' fort. Es gibt die 5 Fälle

$$N' = N+4, N+2, N, N-2, N-4 \text{ mit } v' = v,\ l' = l,\ \alpha' = \alpha,\ m' = m,$$

für die die Matrixelemente nach der N''-Summation wie folgt lauten:

$$\langle [N']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle =$$

1. $N' = N+4$: $C_4\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^2 \ \frac{1}{5}\sqrt{(N-v+4)(N+v+7)(N-v+2)(N+v+5)}$
2. $N' = N+2$: $C_4\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^2 \ \frac{2}{5}(2N+7)\sqrt{(N-v+2)(N+v+5)}$
3. $N' = N$: $C_4\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^2 \ \frac{1}{5}\left[(2N+5)^2+(N-v+2)(N+v+5)+(N-v)(N+v+3)\right]$
4. $N' = N-2$: $C_4\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^2 \ \frac{2}{5}(2N+3)\sqrt{(N-v)(N+v+3)}$
5. $N' = N-4$: $C_4\left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right)^2 \ \frac{1}{5}\sqrt{(N-v-2)(N+v+1)(N-v)(N+v+3)}$

(III.15)

6) $\underline{C_5\,[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}}$

Die Matrixelemente werden zurückgeführt auf die schon ermittelten von $[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}$ und $[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}$.

$$\langle [N']v'\ell\alpha' m | C_5 [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\langle [N']v'\ell\alpha' \| C_5 [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N]v\ell\alpha\rangle =$$

$$C_5\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\sum_{N''v''\ell''\alpha''}\begin{Bmatrix}0 & 0 & 0\\ \ell & \ell & \ell''\end{Bmatrix}\langle [N']v'\ell\alpha' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle\langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}] \| [N]v\ell\alpha\rangle =$$

$$C_5 \frac{1}{2\ell+1} \sum_{N''v''\alpha''} \langle [N']v'\ell\alpha' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N'']v''\ell\alpha'' \rangle \langle [N'']v''\ell\alpha'' \| [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} \| [N]v\ell\alpha \rangle =$$

$$C_5 \sum_{N''v''\alpha''} \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'']v''\ell\alpha''m \rangle \langle [N'']v''\ell\alpha''m | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle =$$

$$\begin{aligned} C_5 \Big[& \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'+2]v'\ell\alpha'm \rangle \langle [N'+2]v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N']v'\ell\alpha'm \rangle \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'-2]v'\ell\alpha'm \rangle \langle [N'-2]v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \Big] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_5 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right) \Big[& \sqrt{\tfrac{1}{5}(N'-v'+2)(N'+v'+5)} \; \langle [N'+2]v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \frac{1}{\sqrt{5}}(2N'+5) \; \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \sqrt{\tfrac{1}{5}(N'-v')(N'+v'+3)} \; \langle [N'-2]v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \Big] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_5 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^{5/2} \Big[& \sqrt{\tfrac{1}{5}(N'-v'+2)(N'+v'+5)} \; \langle [N'+2]v'\ell\alpha'm | [(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \frac{1}{\sqrt{5}}(2N'+5) \; \langle [N']v'\ell\alpha'm | [(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \\ & + \sqrt{\tfrac{1}{5}(N'-v')(N'+v'+3)} \; \langle [N'-2]v'\ell\alpha'm | [(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \Big] \end{aligned}$$

(III.16)

7) $C_6 \, [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}$

Die Matrixelemente lassen sich ausdrücken durch die bereits bekannten des Dreierterms $[\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}$.

$$\langle [N']v'\ell\alpha'm | C_6 [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle =$$

$$C_6 \sum_{N''v''\alpha''} \langle [N']v'\ell\alpha'm | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'']v''\ell\alpha''m \rangle \langle [N'']v''\ell\alpha''m | [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle$$

$$\begin{aligned} C_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \sum_{N''v''\alpha''} & \langle [N']v'\ell\alpha'm | [(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)]^{[0]} | [N'']v''\ell\alpha''m \rangle \\ & \langle [N'']v''\ell\alpha''m | [(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)\times(\beta^+ + \beta)]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m \rangle \end{aligned}$$

(III.17)

8) $D_6 \, [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]}\times\alpha^{[2]}]^{[0]}$

Ähnlich wie beim Viererterm unter 5) gilt:

$$\langle [N']v\ell\alpha m | D_6 [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle =$$

$$D_6 \sum_{N''N'''} \langle [N']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} | [N'']v\ell\alpha m\rangle$$
$$\langle [N'']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} | [N''']v\ell\alpha m\rangle$$
$$\langle [N''']v\ell\alpha m | [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle$$

Diesmal sind die 7 Fälle

$N' = N+6, N+4, N+2, N, N-2, N-4, N-6$ und $v' = v$, $l' = l$, $\alpha' = \alpha$, $m' = m$

möglich, für die die Ergebnisse nach ausgeführter Summation im folgenden angegeben sind.

$$\langle [N']v\ell\alpha m | D_6 [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} | [N]v\ell\alpha m\rangle =$$

1. $N' = N+6$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{1}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v+6)(N+v+9)(N-v+4)(N+v+7)(N-v+2)(N+v+5)}$

2. $N' = N+4$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{3}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v+4)(N+v+7)(N-v+2)(N+v+5)}\,(2N+9)$

3. $N' = N+2$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{1}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5)}\,\big[(2N+9)^2+(2N+9)(2N+5)+(2N+5)^2$
$+(N-v+4)(N+v+7)+(N-v+2)(N+v+5)+(N-v)(N+v+3)\big]$

4. $N' = N$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{1}{5\sqrt{5}}\big[(N-v+2)(N+v+5)(6N+19)$
$+(N-v)(N+v+3)(6N+11)+(2N+5)^3\big]$

5. $N' = N-2$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{1}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v)(N+v+3)}\,\big[(2N+5)^2+(2N+5)(2N+1)+(2N+1)^2$
$+(N-v+2)(N+v+5)+(N-v)(N+v+3)+(N-v-2)(N+v+1)\big]$

6. $N' = N-4$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{3}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v)(N+v+3)(N-v-2)(N+v+1)}\,(2N+1)$

7. $N' = N-6$: $D_6 \left(\frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{5}{B_2^1 C_2^1}}\right)^3 \frac{1}{5}\sqrt{\frac{1}{5}(N-v-4)(N+v-1)(N-v-2)(N+v+1)(N-v)(N+v+3)}$

(III.18)

Durch unser Verfahren zur Lösung der Schrödinger-Gleichung, der Diagonalisierung, bekommen wir die Wellenfunktionen $|\gamma,\ell,m\rangle$ in Form der Entwicklungskoeffizienten $c^{\gamma}(N\,v\,l\,\alpha)$ geliefert

$$|\gamma,\ell,m\rangle = \sum_{Nv\alpha} c^{\gamma}(Nv\ell\alpha)\; |[N]v\ell\alpha m\rangle\,, \qquad \text{(III.19)}$$

einer Form, die besonders vorteilhaft und handlich für die weitere Berechnung von dynamischen Größen ist (die nächsten Abschnitte).

D. Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten

Definition des Quadrupolmoments:

$$Q(\gamma\ell\ m=\ell) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\ \langle \gamma\ell\ m=\ell\ |\ Q_{20}\ |\ \gamma\ell\ m=\ell\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{16\pi}{5}}\ \begin{pmatrix} \ell & 2 & \ell \\ -\ell & 0 & \ell \end{pmatrix} \langle \gamma\ell \| Q^{[2]} \| \gamma\ell\rangle \qquad \text{(III.2}$$

Definition der reduzierten E2-Übergangswahrscheinlichkeit:

$$\mathcal{B}(E2/\gamma\ell\rightarrow\gamma'\ell') = \frac{1}{2\ell+1} \sum_{mm'\mu} |\langle\gamma'\ell'm'\,|\,Q_{2\mu}\,|\,\gamma\ell m\rangle|^2$$
$$= \frac{1}{2\ell+1}\ |\langle\gamma'\ell'\,\|\,Q^{[2]}\,\|\,\gamma\ell\rangle|^2 \qquad \text{(III.2}$$

In beiden Definitionen bedeutet $Q_{2\mu}$ die μ. Komponente des Quadrupo operators $Q^{[2]}$:

$$Q_{2\mu} = \int_{V(Kern)} \rho(\mathbf{r})\, r^2\, Y_{2\mu}\, d\tau \qquad \text{(III.2}$$

Annahmen und Näherungen:

1) Homogene Ladungsverteilung : $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0$
2) Inkompressibilität (Volumenkonstanz) bis zu quadratischen Glieder in $\alpha_{2\mu}$.
3) Berechnung des Quadrupoloperators ebenfalls bis zur 2.Ordnung bezüglich $\alpha_{2\mu}$.

Die Schwerpunktserhaltung $\int r\, Y_{1\mu}\, d\tau = 0$ ist bei Quadrupol-Deformatione automatisch gewährleistet (siehe [22]), so daß sie nicht als zusätzliche Forderung angeführt zu werden brauchte. Zu den 3 Punkten im einzelnen:

Zu 1) Die als konstant angesehene Ladungsdichte des Kerns beträgt in Einheiten der Elementarladung e:

$$\varrho_0 = \frac{3Z}{4\pi R_0^3} = \frac{3Z}{4\pi f_0^3 A} \qquad \text{(III.2}$$

wobei, wie üblich, gesetzt wurde:

$$R_0 = f_0 A^{1/3} \; , \quad f_0 \approx 1.1 \text{ fm} \qquad \text{(III.2}$$

Zu 2) Um die Volumenkonstanz

$$\int\limits_{V(\text{Kern})} d\tau = \frac{4\pi R_0^3}{3} \qquad \text{(III.2}$$

sicherzustellen, müssen wir an der Entwicklung (III.1) der Kernoberfläche nach Kugelfunktionen eine kleine Korrektur $g(\alpha_{2\mu})$ anbringen:

$$R = R_0 \left(1 + g + \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right) \qquad \text{(III.2}$$

Bei der Auswertung von (III.25) werden alle Terme mit Potenzen von $\alpha_{2\mu}$ größer als 2 vernachlässigt; ebenso wird auch g^2 als sehr klein gegenüber g angesehen.

$$\frac{4\pi R_0^3}{3} = \int d\tau = \int_0^{R(\vartheta,\varphi)} r^2 dr\, d\Omega = \frac{1}{3}\int R^3(\vartheta,\varphi)\, d\Omega$$

$$= \frac{1}{3} R_0^3 \int \Big[1 + 3\big(g + \sum_\mu \alpha_{2\mu}(-)^\mu Y_{2-\mu}\big)$$

$$+ 3\big(2g \sum_\mu \alpha_{2\mu}(-)^\mu Y_{2-\mu} + \sum_\mu \sum_{\mu'} \alpha_{2\mu}\alpha_{2\mu'}(-)^\mu Y_{2-\mu}(-)^{\mu'} Y_{2-\mu'}\big)\Big]$$

$$= \frac{4\pi}{3} R_0^3 + R_0^3 \Big[4\pi g + \sum_\mu \alpha_{2\mu}(-)^\mu \alpha_{2-\mu}\Big]$$

Es folgt:

$$g = -\frac{1}{4\pi} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} = -\frac{\sqrt{5}}{4\pi} \left[\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}\right]^{[0]} \qquad \text{(III.2}$$

Diese Korrektur g beeinflußt den Quadrupoloperator allerdings noch nicht, wenn dieser nur bis zur 2.Ordnung aufgestellt wird. Das geht aus der nun folgenden Berechnung des Quadrupoloperators hervor.

Zu 3)

$$Q_{2\mu} = \int\limits_{V(\text{Kern})} \varrho r^2 Y_{2\mu} d\tau = \varrho_0 \int Y_{2\mu} d\Omega \int\limits_0^{R(\vartheta,\varphi)} r^4 dr$$

$$= \frac{1}{5} \varrho_0 R_0^5 \int Y_{2\mu} \Big[1 + 5\big(g + \sum_{\mu'} \alpha_{2\mu'} (-)^{\mu'} Y_{2-\mu'}\big) + 10 \big(\sum_{\mu'}\sum_{\mu''} \alpha_{2\mu'}\alpha_{2\mu''} (-)^{\mu'} Y_{2-\mu'} (-)^{\mu''} Y_{2-\mu''}\big)\Big] d\Omega$$

$$= \frac{1}{5} \varrho_0 R_0^5 \Big[5\alpha_{2\mu} + 10 \cdot 5 \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\mu'\mu''} (-)^{\mu'+\mu''} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \mu & -\mu' & -\mu'' \end{pmatrix} \alpha_{2\mu'}\alpha_{2\mu''}\Big]$$

$$= \varrho_0 R_0^5 \Big[\alpha_{2\mu} - 10 \frac{1}{\sqrt{14\pi}} \sum_{\mu'\mu''} (-)^{\mu'+\mu''} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \mu & -\mu' & -\mu'' \end{pmatrix} \alpha_{2\mu'}\alpha_{2\mu''}\Big]$$

$$= \varrho_0 R_0^5 \Big[\alpha_{2\mu} - \frac{10}{\sqrt{70\pi}} \sum_{\mu'\mu''} \langle 2\mu', 2\mu'' | 2\mu\rangle \alpha_{2\mu'}\alpha_{2\mu''}\Big]$$

Also

$$Q_{2\mu} = \varrho_0 R_0^5 \Big[\alpha_{2\mu} - \frac{10}{\sqrt{70\pi}} [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[2]}_{\mu}\Big] \qquad \text{(III.2}$$

Der volumenerhaltende Term $g(\alpha_{2\mu})$ wirkte sich bei dieser Ableitung, die höchstens quadratische Ausdrücke in $\alpha_{2\mu}$ berücksichtigte, nicht aus. Das bedeutet, daß der Quadrupoloperator 2.Ordnung die Volumenkonstanz 2.Ordnung automatisch erfüllt.

Der Ansatz (III.6) für die Kollektivvariablen führt schließlich auf den Quadrupoloperator in 2.Quantisierung:

$$Q_{2\mu} = \frac{3Z f_0^2 A^{2/3}}{4\pi} \Big(\frac{1}{2}\sqrt{\hbar\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}}\Big) \big(\beta^+_\mu + (-)^\mu \beta_{-\mu}\big) \qquad \text{(III.2}$$

$$- \frac{3Z f_0^2 A^{2/3}}{4\pi} \frac{10}{\sqrt{70\pi}} \Big(\frac{1}{4}\hbar \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\Big) \Big([\beta^+ \times \beta^+]^{[2]}_\mu + [\beta^+ \times \beta]^{[2]}_\mu + [\beta \times \beta^+]^{[2]}_\mu + [\beta \times \beta]^{[2]}_\mu$$

Setzt man jetzt die Kernwellenfunktionen (III.19) zusammen mit dem Quadrupoloperator (III.29) in die Formeln (III.20) und (III.21) für das Quadrupolmoment und die Übergangswahrscheinlichkeit ein, und entkoppelt man die Ausdrücke der Art $[\beta^+ \times \beta^+]^{[2]}_{\mu}$ usw., so folgt

$$
\begin{aligned}
Q(\gamma \ell\, m=\ell) = {} & \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \sqrt{\frac{\ell(2\ell-1)}{(2\ell+1)(\ell+1)(2\ell+3)}} \sum_{N'v'\alpha'} \sum_{Nv\alpha} c^{\gamma}(N'v'\ell\alpha')\, c^{\gamma}(Nv\ell\alpha) \\
& \Big[D_1 \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle + D_1 \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta^+ \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta^+ \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell\alpha' \| \beta \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle
\end{aligned}
$$

(III.30)

$$
\begin{aligned}
B(E2/\gamma\ell \to \gamma'\ell') = {} & \frac{1}{2\ell+1} \Big| \sum_{N'v'\alpha'} \sum_{Nv\alpha} c^{\gamma'}(N'v'\ell'\alpha')\, c^{\gamma}(Nv\ell\alpha) \\
& \Big[D_1 \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle + D_1 \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5}\,(-)^{\ell+\ell'} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell' & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta^+ \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5}\,(-)^{\ell+\ell'} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell' & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta^+ \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5}\,(-)^{\ell+\ell'} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell' & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta^+ \| [N]v\ell\alpha\rangle \\
& + D_2\sqrt{5}\,(-)^{\ell+\ell'} \sum_{N''v''\ell''\alpha''} \begin{Bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ \ell & \ell' & \ell'' \end{Bmatrix} \langle [N']v'\ell'\alpha' \| \beta \| [N'']v''\ell''\alpha''\rangle \langle [N'']v''\ell''\alpha'' \| \beta \| [N]v\ell\alpha\rangle
\end{aligned}
$$

(III.31)

wobei

$$
\begin{aligned}
D_1 &= \frac{3Zf_0^2 A^{2/3}}{4\pi} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\hbar \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}} \right) \\
D_2 &= - \frac{3Zf_0^2 A^{2/3}}{4\pi} \, \frac{10}{\sqrt{70\pi}} \left(\frac{1}{4}\, \hbar \sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}} \right)
\end{aligned}
$$

(III.32)

Wie schon die wichtigsten Matrixelemente des Hamilton-Operators (im vorigen Abschnitt) sind nun auch Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten auf die reduzierten Matrixelemente von β^+_{μ} und $(-)^{\mu}\beta_{-\mu}$ zurückgeführt.

Tabelle III.1 vergleicht die Werte einiger Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten bei Verwendung des Quadrupoloperators 1. und 2.Ordnung: links bei einem willkürlich herausgegriffenen anharmonischen Vibrator und rechts bei einem achsialsymmetrisch deformierten Kern.

	1.Ordng.	2.Ordng.		1.Ordng.	2.Ordng.
Q: $2^+(1)$	-0.146	-0.279	$2^+(g)$	-1.731	-1.941
$2^+(2)$	0.043	0.077	$4^+(g)$	-2.208	-2.487
$4^+(1)$	-0.342	-0.582	$2^+(\beta)$	-1.092	-1.261
$4^+(2)$	-0.067	-0.172	$4^+(\beta)$	-1.389	-1.626
$2^+(3)$	-0.393	-0.539	$2^+(\gamma)$	1.089	1.225
BE: $0^+(1)\rightarrow 2^+(1)$	1.812	1.838	$0^+(g)\rightarrow 2^+(g)$	3.669	4.592
$0^+(1)\rightarrow 2^+(2)$	0.002	0.008	$0^+(\beta)\rightarrow 2^+(\beta)$	2.966	3.582
$2^+(2)\rightarrow 4^+(1)$	0.008	0.023	$2^+(\gamma)\rightarrow 3^+(\gamma)$	1.459	1.199
$2^+(2)\rightarrow 4^+(2)$	0.888	0.909	$0^+(g)\rightarrow 2^+(\beta)$	0.012	0.040
$0^+(2)\rightarrow 2^+(2)$	0.128	0.229	$2^+(\beta)\rightarrow 3^+(\gamma)$	0.077	0.048

Tabelle III.1

Die deutlichen Unterschiede lassen vermuten, daß wohl auch in 2.Näherung noch nicht das letzte Wort über die beiden dynamischen Größen gesprochen ist.

Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten werden in dieser Arbeit ausnahmslos in Einheiten von

$$\begin{aligned} &10^{-24}\ e\ cm^2 \quad \text{(bei Q)} \\ &10^{-48}\ e^2\ cm^4 \quad \text{(bei BE)} \end{aligned} \qquad \text{(III.33)}$$

angegeben. Wie schon in Tabelle III.1 werden deshalb auch später diese Einheiten nicht mehr besonders angeführt.
Außerdem ist in allen Rechnungen einheitlich A=162, Z=66 und r_0=1.1 gesetzt, um die einzelnen Fälle vergleichbar zu machen.

E. Radien

Definition des mittleren quadratischen Radius des Zustandes $|\gamma, \ell, m\rangle$:

$$\langle r^2 \rangle = \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{\int\limits_{V(Kern)} \rho(\mathbf{r})\, r^2\, d\tau}{\int\limits_{V(Kern)} \rho(\mathbf{r})\, d\tau} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle \qquad \text{(III.34)}$$

Die Annahmen und Näherungen sind dieselben wie bei Quadrupolmomenten und Übergangswahrscheinlichkeiten:

1) Homogene Ladungsverteilung
2) Volumenkonstanz bis zur 2.Ordnung
3) Vernachlässigung höherer als quadratischer Terme

Für 1) und 2) gilt wörtlich dasselbe wie im vorigen Abschnitt III.D.

Zu 3)

$$\langle r^2 \rangle = \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{\int d\Omega \int_0^{R(\vartheta,\varphi)} r^4\, dr}{\int d\Omega \int_0^{R(\vartheta,\varphi)} r^2\, dr} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle = \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{\int d\Omega\, \frac{1}{5} R^5(\vartheta,\varphi)}{\int d\Omega\, \frac{1}{3} R^3(\vartheta,\varphi)} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

$$= \frac{3}{5} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{\int d\Omega \left[1 - \frac{1}{4\pi} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right]^5}{\int d\Omega \left[1 - \frac{1}{4\pi} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right]^3} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

$$= \frac{3}{5} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{\int d\Omega \left[1 - \frac{5}{4\pi} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + 5 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu} + 10 \left(\sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right)^2\right]}{\int d\Omega \left[1 - \frac{3}{4\pi} \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + 3 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu} + 3 \left(\sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu Y_{2-\mu}\right)^2\right]} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

$$= \frac{3}{5} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| \frac{4\pi - 5 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + 10 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu}}{4\pi - 3 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} + 3 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu}} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

$$= \frac{3}{20\pi} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| 4\pi + 5 \sum_\mu \alpha_{2\mu} (-)^\mu \alpha_{2-\mu} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

$$= \frac{3}{20\pi} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| 4\pi + 5\sqrt{5}\, [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle$$

Also

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{5} R_0^2 + \frac{3\sqrt{5}}{4\pi} R_0^2 \left\langle \gamma, \ell, m \left| [\alpha^{[2]} \times \alpha^{[2]}]^{[0]} \right| \gamma, \ell, m \right\rangle \qquad \text{(III.35)}$$

Die Volumenkonstanz spielt also (anders als im letzten Abschnitt) durchaus eine Rolle für den mittleren quadratischen Radius in 2.Ordnung.

Die Kernwellenfunktion (III.19) in (III.35) eingesetzt und auf die drei möglichen Fälle (III.13) zurückgegriffen, ergibt

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle = \frac{3}{5} f_0^2 A^{2/3} + \frac{3\sqrt{5}}{4\pi} f_0^2 A^{2/3} \left(\frac{1}{4}\hbar\sqrt{\frac{5}{B_2' C_2'}}\right) \sum_{N v \alpha} c^{\gamma}(N v \ell \alpha) \\ \Big[c^{\gamma}(N-2, v \ell \alpha) \sqrt{\tfrac{1}{5}(N-v)(N+v+3)} \\ + c^{\gamma}(N v \ell \alpha) \tfrac{1}{\sqrt{5}} (2N+5) \\ + c^{\gamma}(N+2, v \ell \alpha) \sqrt{\tfrac{1}{5}(N-v+2)(N+v+5)} \Big]\end{aligned} \qquad \text{(III.36)}$$

Als Radius wird in dieser Arbeit nie $\langle r^2\rangle$ sondern stets $\sqrt{\langle r^2\rangle}$ angegeben und zwar durchgehend in Einheiten von

$$\text{fm} = 10^{-13}\ \text{cm} \qquad \text{(III.37)}$$

In allen angeführten Fällen ist auch wieder A=162 und f_0=1.1 gesetzt.

F. Konvergenz und Genauigkeit

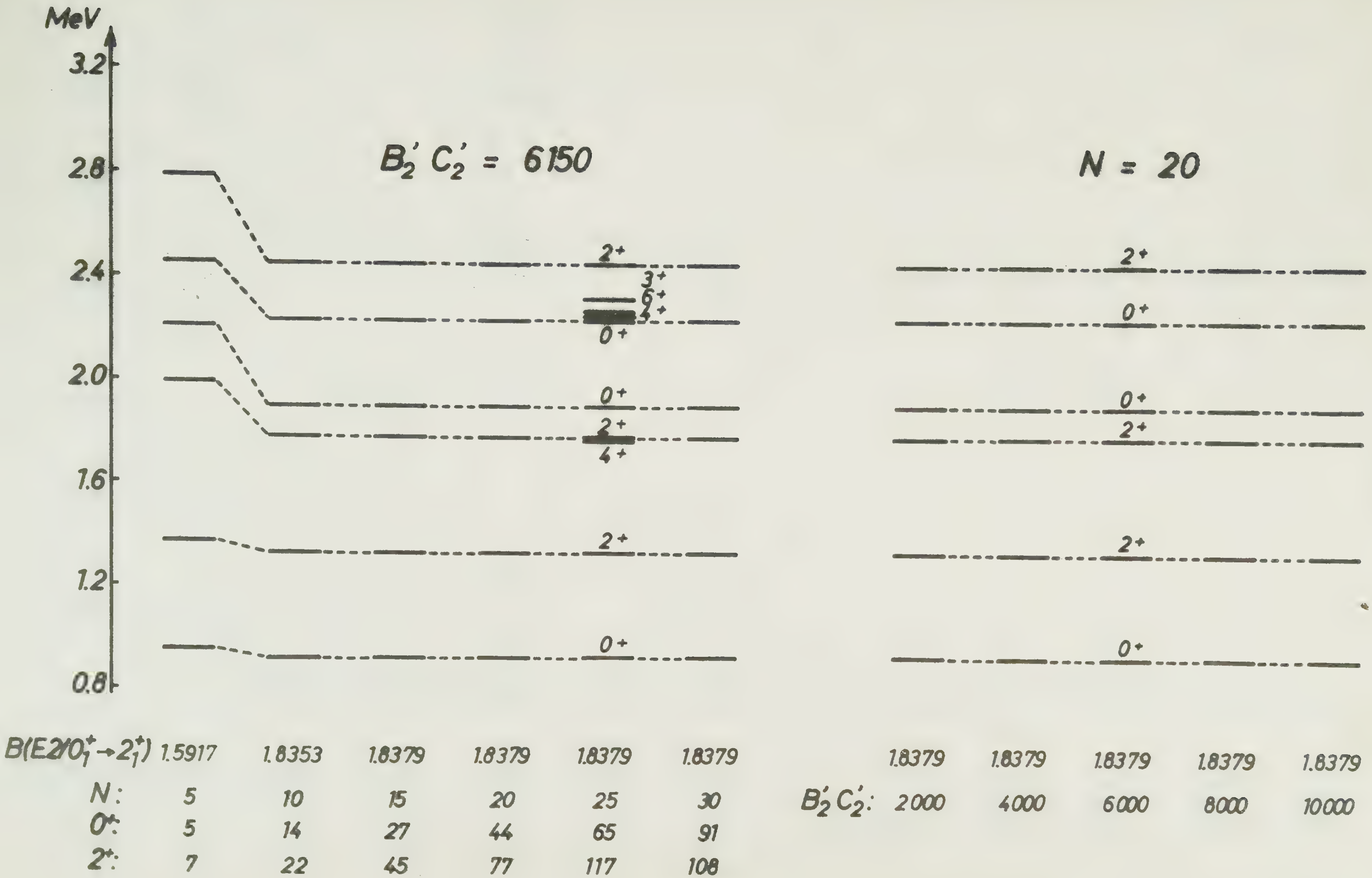
Zwei Fragen stellen sich.

Nach der Konvergenz zum einen: Sind unsere Basisfunktionen, die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, überhaupt geeignet, um auch die Rotationen achsialsymmetrischer oder asymmetrischer Rotatoren zu beschreiben? Wie groß muß die Basis gemacht werden? Reichen 33 Phononen?

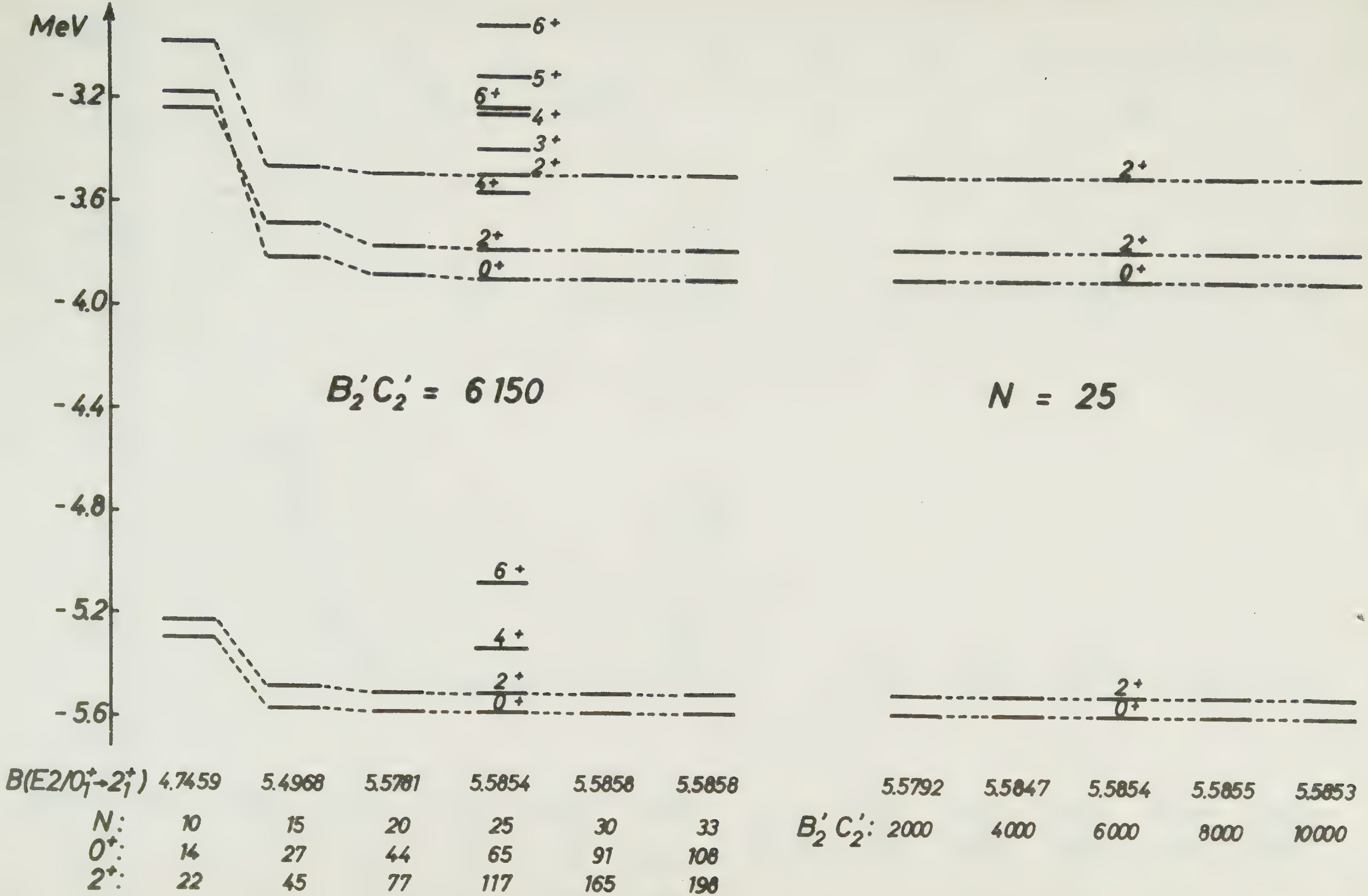
Nach der Genauigkeit zum andern: Welcher Grad an Zuverlässigkeit ist den Energien, Übergangswahrscheinlichkeiten, Quadrupolmomenten und Radien noch beizumessen nach einer Serie von numerischen Schritten, deren wichtigste in Stichworten wiederholt seien:

1. Lösung von ca. 240 linearen teilweise sehr großen Gleichungssystemen (I.67).
2. Unitäre Transformationen (I.62) der R(5)-Wigner-Koeffizienten von der mathematischen auf die physikalische Basis mittels der im ersten Schritt erhaltenen Transformationskoeffizienten.
3. Zurückführung der Matrixelemente des Hamilton-Operators auf die im zweiten Schritt (im wesentlichen) bestimmten reduzierten Matrixelemente und Aufbau der Energiematrix (Abschnitt III.C.).
4. Diagonalisierung.
5. Berechnung der übrigen dynamischen Größen mit den aus der Diagonalisierung resultierenden Wellenfunktionen (Abschnitte III.D., III.E.).

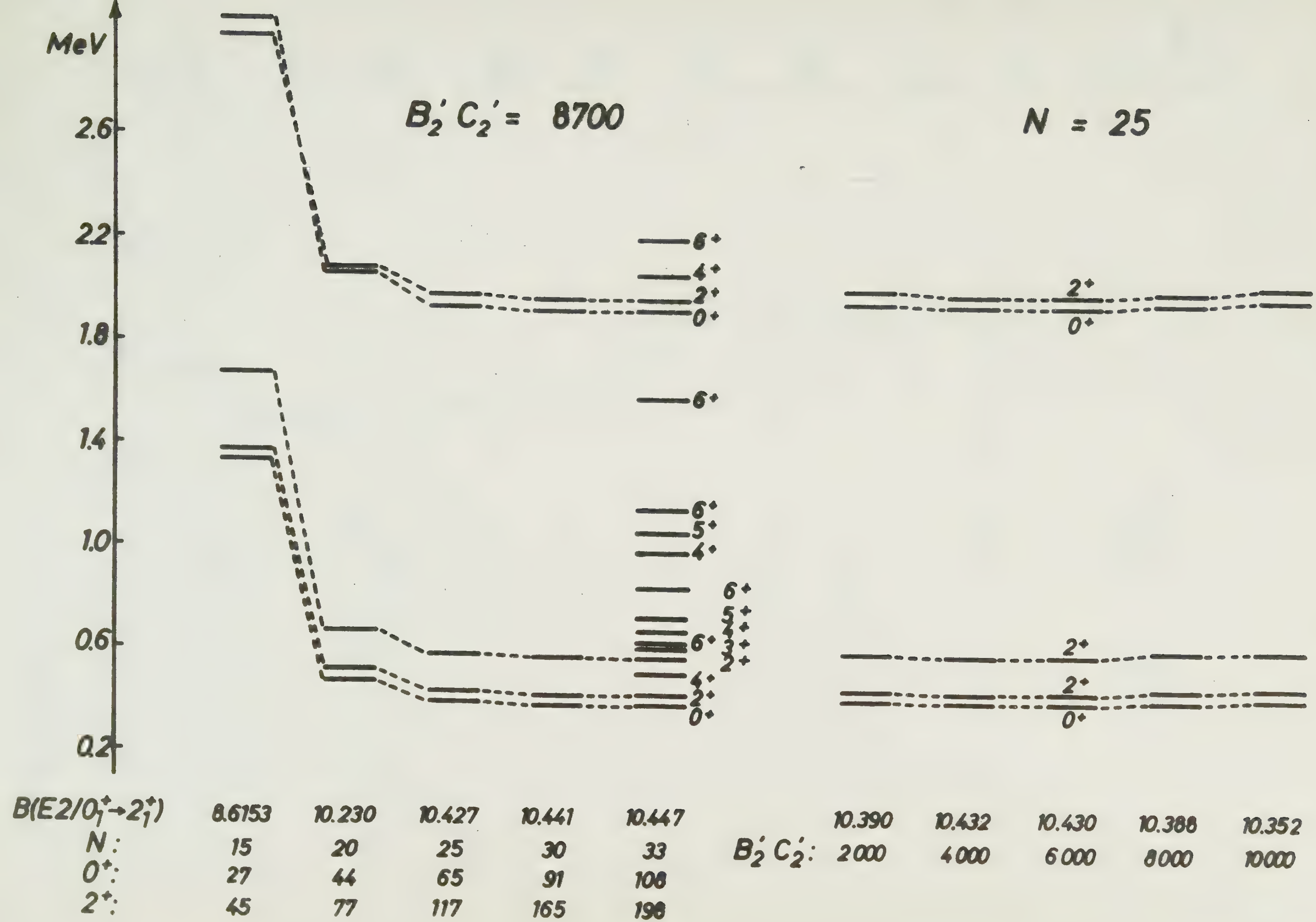
In den Figuren III.1, III.2 und III.3 wird die erste Frage beantwortet durch drastische Änderung der Anzahl der Basisfunktionen (links) und durch einschneidende Abwandlung des Basisoszillators (rechts), für den nach Abschnitt III.B. das Produkt $B_2' C_2'$ maßgebend ist. Für einen anharmonischen Vibrator (mit der Fläche der Figur III.20), einen sehr stark deformierten prolaten Kern mit einer Minimumstiefe von fast 9 MeV (Fläche in Figur III.26) und für einen asymmetrischen Kreisel (zugehörige Fläche in Figur III.17) werden stellvertretend die untersten 0^+- und 2^+-Zustände und die reduzierten Übergangswahrscheinlichkeiten $B(E2/0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ verfolgt. Tabelle III.2 gibt die Matrizengrößen für die einzelnen Drehimpulse bei verschiedenen Phononenzahlen an. Wir erreichen N = 33; bei l = 6 drei Phononen weniger.


MeV
3.2
2.8
2.4
2.0
1.6
1.2
0.8
$B_2' C_2' = 6150$
N = 20
2+
3+
6+
4+
0+
0+
2+
4+
2+
0+
2+
0+
0+
2+
2+
0+
B(E2/0$_1^+$→2$_1^+$) 1.5917 1.8353 1.8379 1.8379 1.8379 1.8379
N: 5 10 15 20 25 30
0+: 5 14 27 44 65 91
2+: 7 22 45 77 117 108
1.8379 1.8379 1.8379 1.8379 1.8379
$B_2' C_2'$: 2000 4000 6000 8000 10000

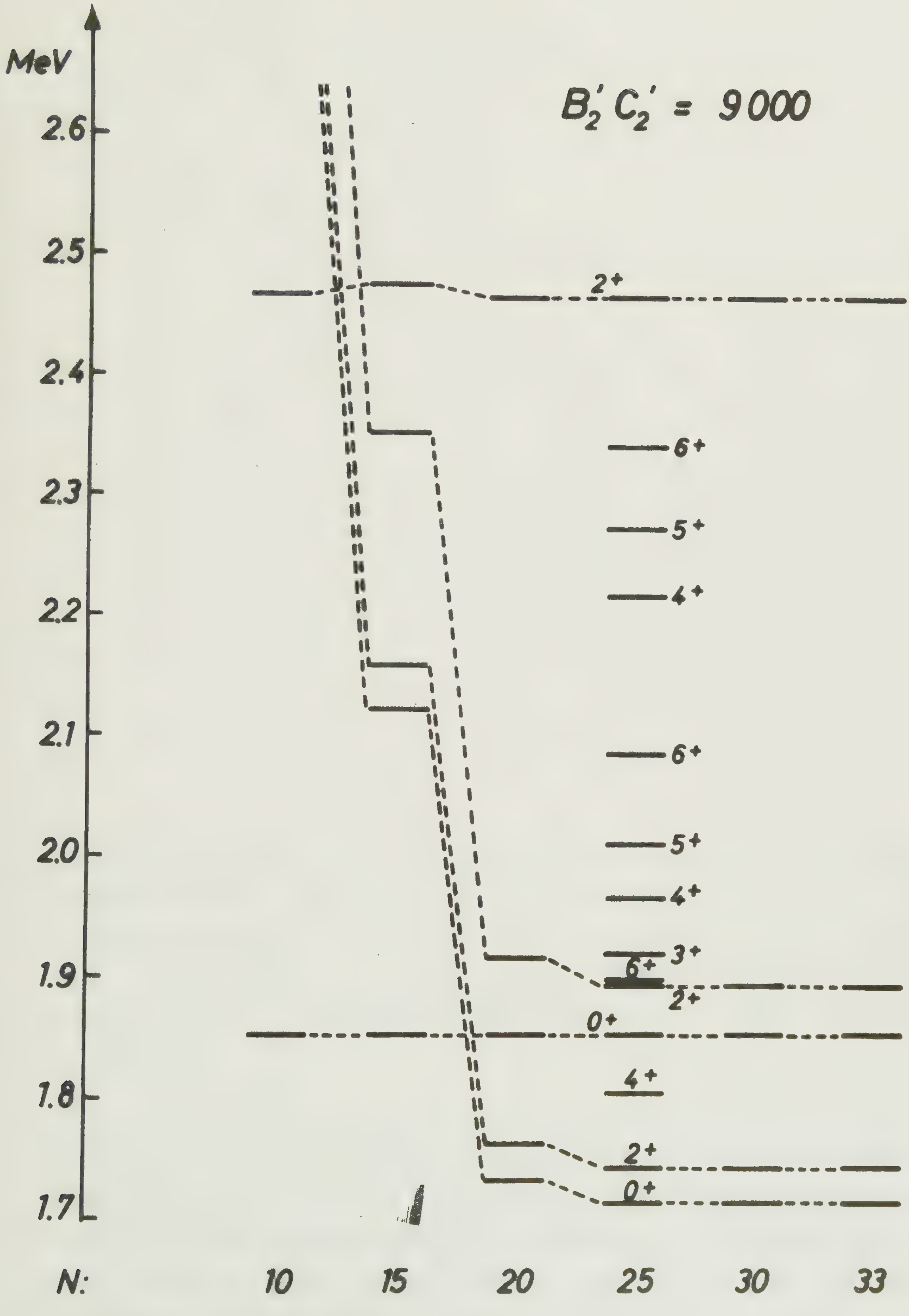
Figur III.1


MeV
-3.2
-3.6
-4.0
-4.4
-4.8
-5.2
-5.6
6+
5+
6+
4+
3+
2+
4+
2+
0+
6+
4+
2+
0+
2+
2+
0+
2+
0+
$B_2'C_2' = 6150$
N = 25
B(E2/0$_1^+$→2$_1^+$) 4.7459 5.4968 5.5781 5.5854 5.5858 5.5858
N: 10 15 20 25 30 33
0+: 14 27 44 65 91 108
2+: 22 45 77 117 165 198
5.5792 5.5847 5.5854 5.5855 5.5853
$B_2'C_2'$: 2000 4000 6000 8000 10000

Figur III.2


MeV
2.6
2.2
1.8
1.4
1.0
0.6
0.2
B₂' C₂' = 8700
N = 25
6+
4+
2+
0+
6+
5+
4+
6+
5+
4+
3+
2+
B(E2/0₁⁺→2₁⁺) 8.6153 10.230 10.427 10.441 10.447
N: 15 20 25 30 33
0⁺: 27 44 65 91 108
2⁺: 45 77 117 165 198
10.390 10.432 10.430 10.388 10.352
B₂' C₂': 2000 4000 6000 8000 10000

Figur III.3


MeV
$B_2' C_2' = 9000$
2.6
2.5
2.4
2.3
2.2
2.1
2.0
1.9
1.8
1.7
2+
6+
5+
4+
6+
5+
4+
3+
6+
2+
0+
4+
2+
0+
N:
10
15
20
25
30
33

Figur III.4

Die Parameter der Basis und des Hamilton-Operators werden in dieser Arbeit immer in folgenden Einheiten angegeben:

$$\begin{aligned} &B_\nu \quad \text{in} \quad 10^{-42} \text{ MeV sec}^2 \\ &P_\nu \quad \text{in} \quad 10^{40} \text{ 1/(MeV sec}^2) \\ &C_\nu \quad \text{in} \quad \text{MeV} \\ &\text{dementsprechend} \\ &B_2' C_2' \quad \text{in} \quad 10^{-42} \text{ MeV}^2 \text{ sec}^2 \end{aligned} \qquad \text{(III.38)}$$

l =	0	2	3	4	5	6
N = 5	5	7	2	6	2	4
10	14	22	8	25	12	24
15	27	45	19	56	30	61
20	44	77	33	100	57	114
25	65	117	52	156	92	184
30	91	165	75	225	135	271
33	108	198	91	272	165	

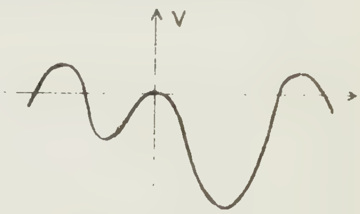
Tabelle III.2

Fazit: In allen Fällen wird ausgezeichnete Konvergenz erreicht. Beim anharmonischen Vibrator sind 15 Phononen vollauf genug. Bei Übergangskernen und leicht deformierten Kernen reichen zu unserer Überraschung 15 bis 25 Phononen, bei sehr stark deformierten Kernen und asymmetrischen Kreiseln schließlich garantieren 25 bis 33 Phononen für exakte Ergebnisse.

Ein sicherer Hinweis auf die gute Konvergenz ist auch die erstaunliche Unempflindlichkeit der dynamischen Resultate gegen die Abänderung des Basisoszillators, den wir über einen extrem weiten Bereich variierten. Im Falle des asymmetrischen Kreisels (Figur III.3) wurde dabei absichtlich eine zu kleine Basis verwendet, weil wir auf diese Weise einen optimalen Basisoszillator zu finden hofften. In den meisten der Rechnun-

gen der kommenden Abschnitte sind B′C′-Werte von etwa 6000 gewählt.

Bei Flächen mit 2 Minima (Abschnitt III.J.) ist die Konvergenz für die einzelne Zustände unterschiedlich. Die Niveaus, die zum sphärischen Minimum gehören, pendeln sich schon nach wenigen Phononen in ihre tatsächliche Lage ein, die Niveaus des deformierten Minimums erreichen ihre endgültigen Werte erst bei großen Basen (Figur III.4; zugehörige Fläche Figur III.28).
In der Praxis erkennt man die Güte der Konvergenz sehr schnell und ohne zusätzliche Rechnungen an den Wellenfunktionen. Tragen z.B. die letzten 50 Basisfunktionen praktisch nichts mehr zur physikalischen Wellenfunktion bei, so ist die Konvergenz sichergestellt. Ebenfalls an Hand der Wellenfunktionen kann man unechte Zustände aussortieren, die bei Potentialen mit äußerst flachen Spaltschwellen auftauchen (Figur III.5) und vom Bereich außerhalb des Potentialtopfes herrühren. Selbst bei geringfügigen Abänderungen der Größe oder Eigenschaft der Basis werden diese unechten Zustände in ganz andere Energiebereiche gestoßen, während die Zustände innerhalb der kollektiven Potentialfläche sich nicht rühren, d.h. von den falschen Zuständen unbeeinflußt sind.



Figur III.5

Die zweite Frage (nach der Genauigkeit) könnte durch Diagonalisierung von Spezialfällen beantwortet werden, für die exakte Lösungen bekannt sind. Der harmonische Oszillator ist kein echter Test, da selbst bei seiner Diagonalisierung in der Basis eines anderen Oszillators nur die wenigen Matrixelemente (III.11) und (III.13) zweier γ-unabhängiger Terme gebraucht werden. Andere Spezialfälle, wie steife Rotatoren oder asymmetrische Kreisel, decken sich nicht völlig mit früher gerechneten Modellen; die alten Modelle verletzen z.B. die Rotationsinvarianz. In denjenigen Beispielen des Abschnitts III.I., die beinahe vergleichbar sind mit früheren Modellen (besonders der Kern der Figur III.15), findet man auch die altbekannten Relationen der dynamischen Größen (Formeln (III.40) bis (III.42)) näherungsweise verwirklicht.

Unser Vertrauen in die Genauigkeit der Methode schöpfen wir aber hauptsächlich aus der lückenlosen Entsprechung von dynamischen Resultaten und physikalischem Sinn in Fällen, wo es auf besondere Genauigkeit ankommt. Nur ein Beispiel:
Die Zentrifugalstreckung wirkt sich bei mittleren quadratischen Radien erst in der 4. oder 5.Stelle aus. Wäre unser Verfahren nur auf 3 oder 4 Stellen genau, so würden wir positive und negative Werte von

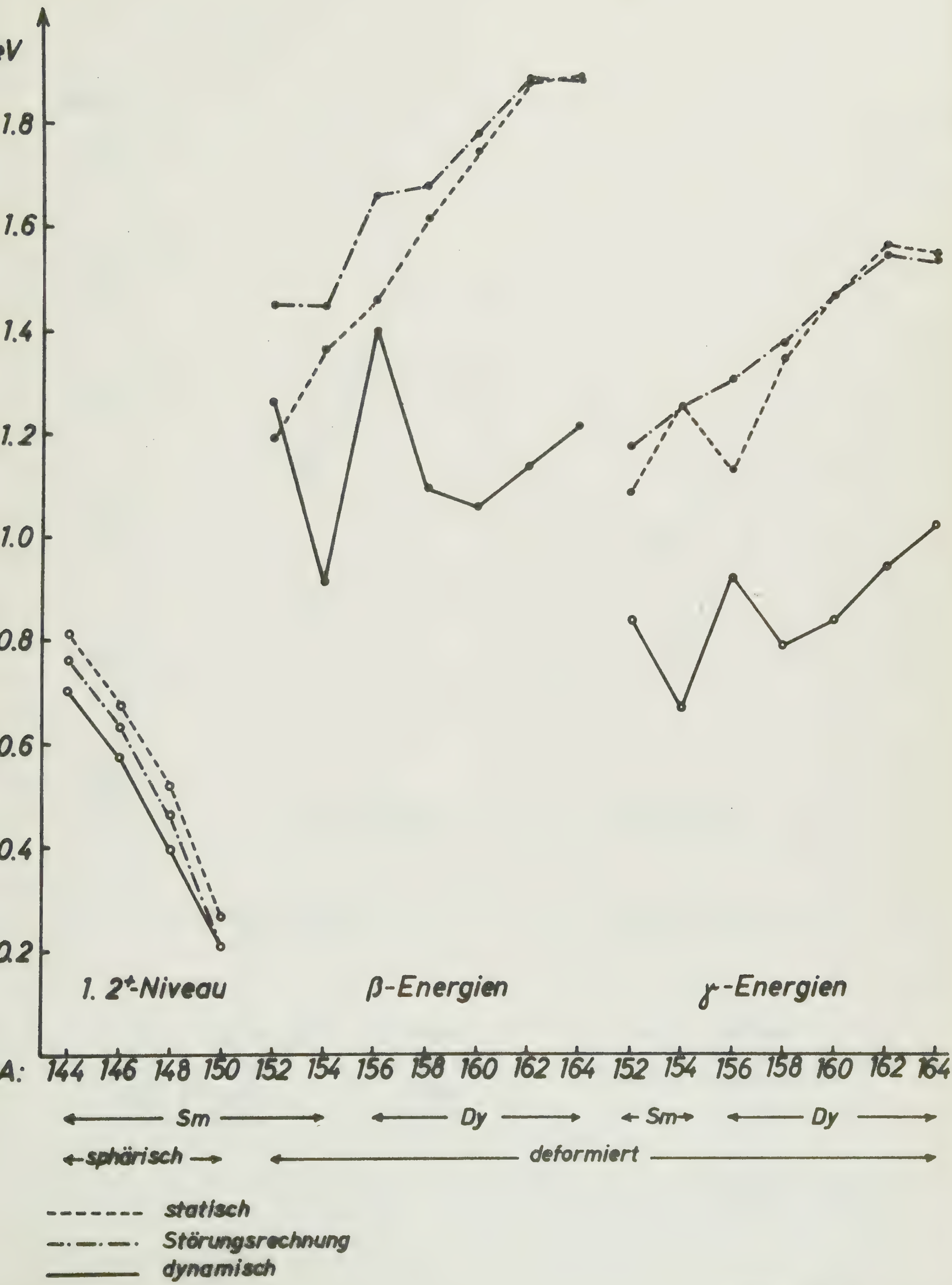
$$\Delta \langle r^2 \rangle = \langle r^2(2_1^+) \rangle - \langle r^2(0_1^+) \rangle$$

in zufälliger Folge beobachten. Doch bisher ging in allen Fällen der richtige, nämlich der positive, Wert aus den Rechnungen hervor (einige Beispiele im Abschnitt III.I.).

G. Statik und Dynamik

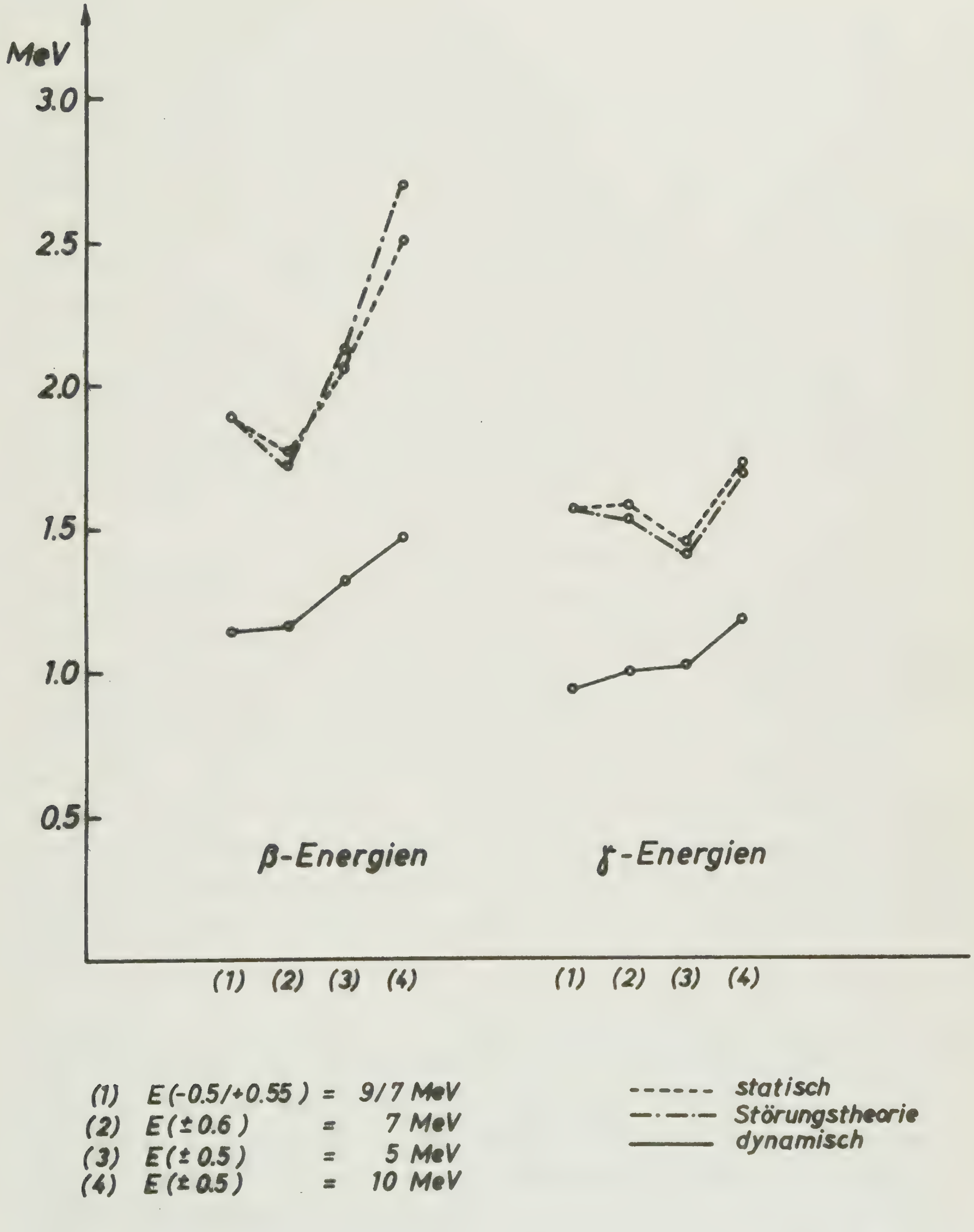
Die Ermittlung von Anregungsenergien allein aus bestimmten Krümmungen der kollektiven Potentialfläche heiße Statik.
Auf der Basis der von Mosel [1] mikroskopisch berechneten Flächen der Sm- und Dy-Isotope werden in Figur III.6 die statischen, die störungstheoretischen (siehe [1]) und die dynamischen Energie-Werte der interessantesten angeregten Niveaus verglichen. Figur III.7 zeigt zusätzlich die Abhängigkeit dieser Werte von künstlichen Randbedingungen im Moselschen Verfahren. Bei jeder Methode liegt die gleiche kollektive Potentialfläche und die gleiche kinetische Energie zugrunde.

Beide Abbildungen weisen eindriglich auf das Zusammenspiel aller Freiheitsgrade, d.h. auf die Notwendigkeit der Dynamik, hin.



eV
1.8
1.6
1.4
1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
1. 2+-Niveau
β-Energien
γ-Energien
A: 144 146 148 150 152 154 156 158 160 162 164 152 154 156 158 160 162 164
Sm
Dy
Sm
Dy
sphärisch
deformiert
statisch
Störungsrechnung
dynamisch

Figur III.6


MeV
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
β-Energien
γ-Energien
(1) (2) (3) (4)
(1) (2) (3) (4)
(1) E(-0.5/+0.55) = 9/7 MeV
(2) E(± 0.6) = 7 MeV
(3) E(± 0.5) = 5 MeV
(4) E(± 0.5) = 10 MeV
statisch
Störungstheorie
dynamisch

Figur III.7

H. Kinetische Energie

Im Gegensatz zur potentiellen Energie, bei der die kollektive Potentialfläche die Kerneigenschaften sichtbar macht, können wir die Parameter P_2 und P_3 der kinetischen Energie in unserem Modell nicht unmittelbar mit der Kernstruktur in Verbindung bringen. In den früheren Kollektivmodellen, die sich auf die harmonische Näherung für die kinetische Energie beschränkten, ist B_2 proportional den Trägheitsmomenten. Erst wenn die mikroskopische Berechnung der kinetischen Energie durch Grumann [2] abgeschlossen ist, wird der kinetische Aspekt zufriedenstellend gelöst sein. Vorerst müssen wir uns damit begnügen, die Veränderungen der kollektiven Spektren bei Variation der kinetischen Parameter zu untersuchen. Immerhin hat bisher eine systematische Analyse gefehlt, die den Einfluß der Anharmonizität der kinetischen Energie auf die verschiedenen Kerntypen klarstellt.

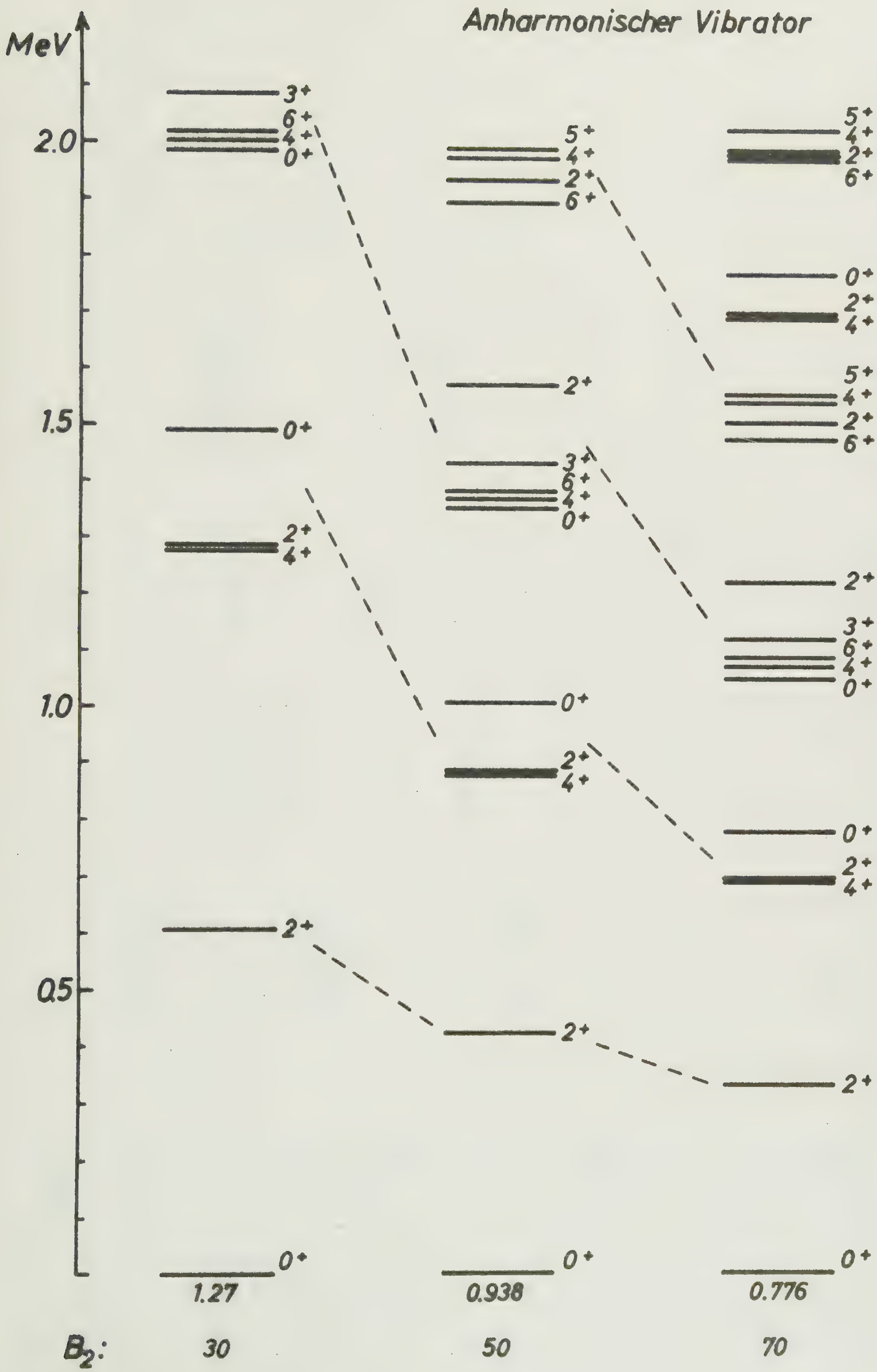
Die Figuren III.8 und III.9 zeigen die Spektren eines anharmonischen Vibrators (Fläche in Figur III.20) in Abhängigkeit von B_2 und P_3: B_2 dehnt oder staucht die Spektren, läßt aber ansonsten sowohl die Multiplett-Struktur als auch die Reihenfolge der Multiplett-Mitglieder unangetastet. Dagegen bewirkt die Anharmonizität eine bemerkenswerte Umgruppierung innerhalb der Multipletts. Erst mittels des P_3 - Terms gelingt es, den 2^+-Zustand als unterstes Niveau des Tripletts zu bekommen. Erscheint dieser Fall im Experiment, so braucht trotzdem nicht unbedingt ein Effekt der kinetischen Energie vorliegen; denn auch für bestimmte Klassen nichtsphärischer kollektiver Potentialflächen haben die ersten beiden angeregten Zustände den Spin 2 (Figuren III.23 und III.34)

Den Einfluß von B_2 und P_3 auf die Spektren achsialsymmetrisch deformierter Kerne zeigen die Figuren III.10 und III.11. Große B_2 senken die einzelnen Zustände tiefer in den Potentialtopf hinab, machen den Rotator gewissermaßen steifer und führen deshalb auf reinere Bandenstrukturen gemessen am I(I+1)-Gesetz. Auch der anharmonische kinetische Term erhält die Bandenstruktur, verändert aber durchaus die relative Lage der Banden zueinander und damit auch die Wechselwirkung zwischen den Banden (siehe die Übergangswahrscheinlichkeiten). Der P_3 - Term wirkt grob ge-

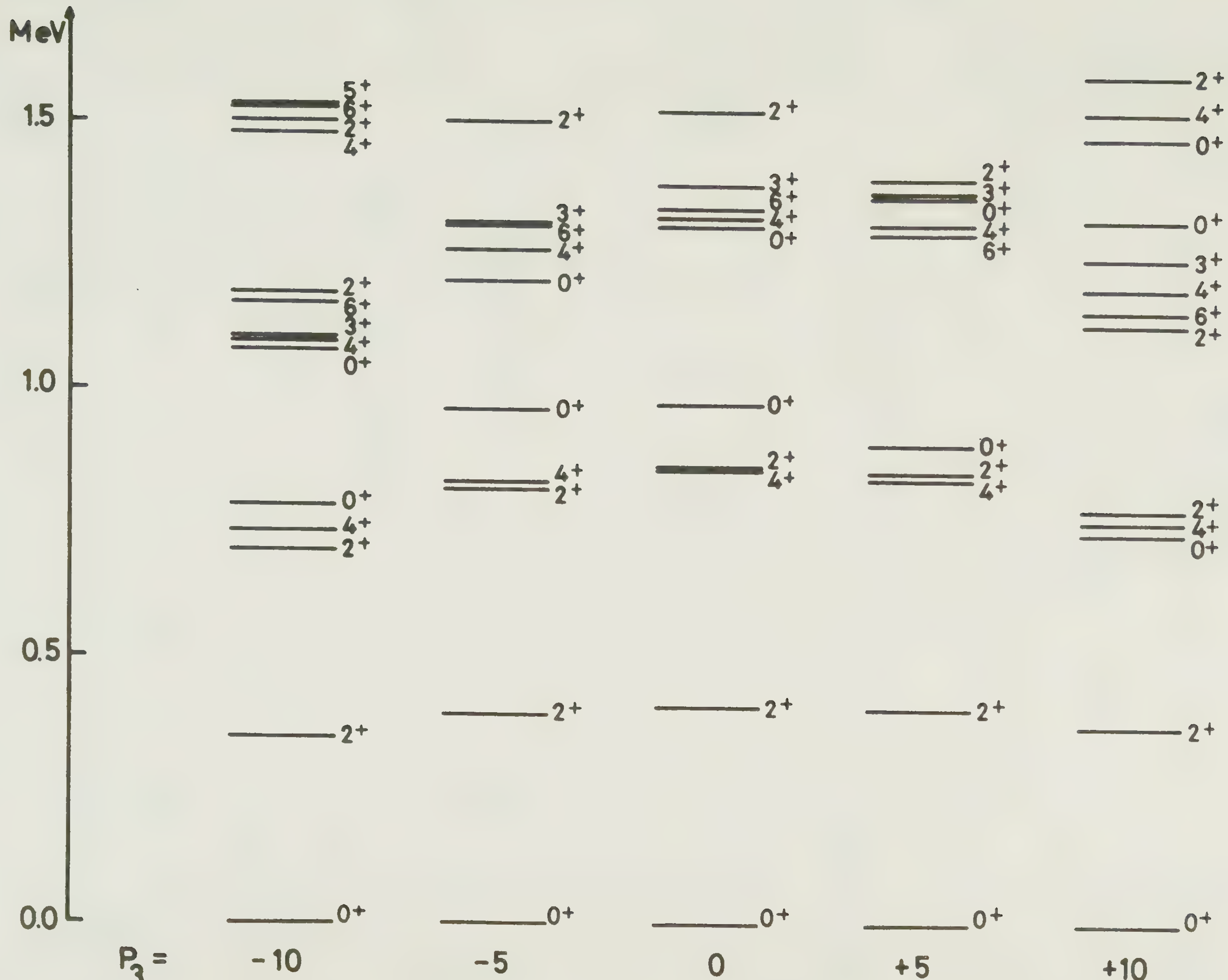
sprochen wie ein Vergrößern oder Verkleinern der prolate-oblate-Differenz der kollektiven Potentialfläche.

Für den dreiachsialen Kreisel der Figur III.17 wird in den Figuren III.12 und III.13 der Einfluß der kinetischen Energie demonstriert. Während B_2 wieder nur zu energetischen Dehnungen oder Stauchungen der Spektren führt, rührt P_3 auch an der gegenseitigen Position der Rotationsbanden und beeinflußt die Wechselwirkungen.
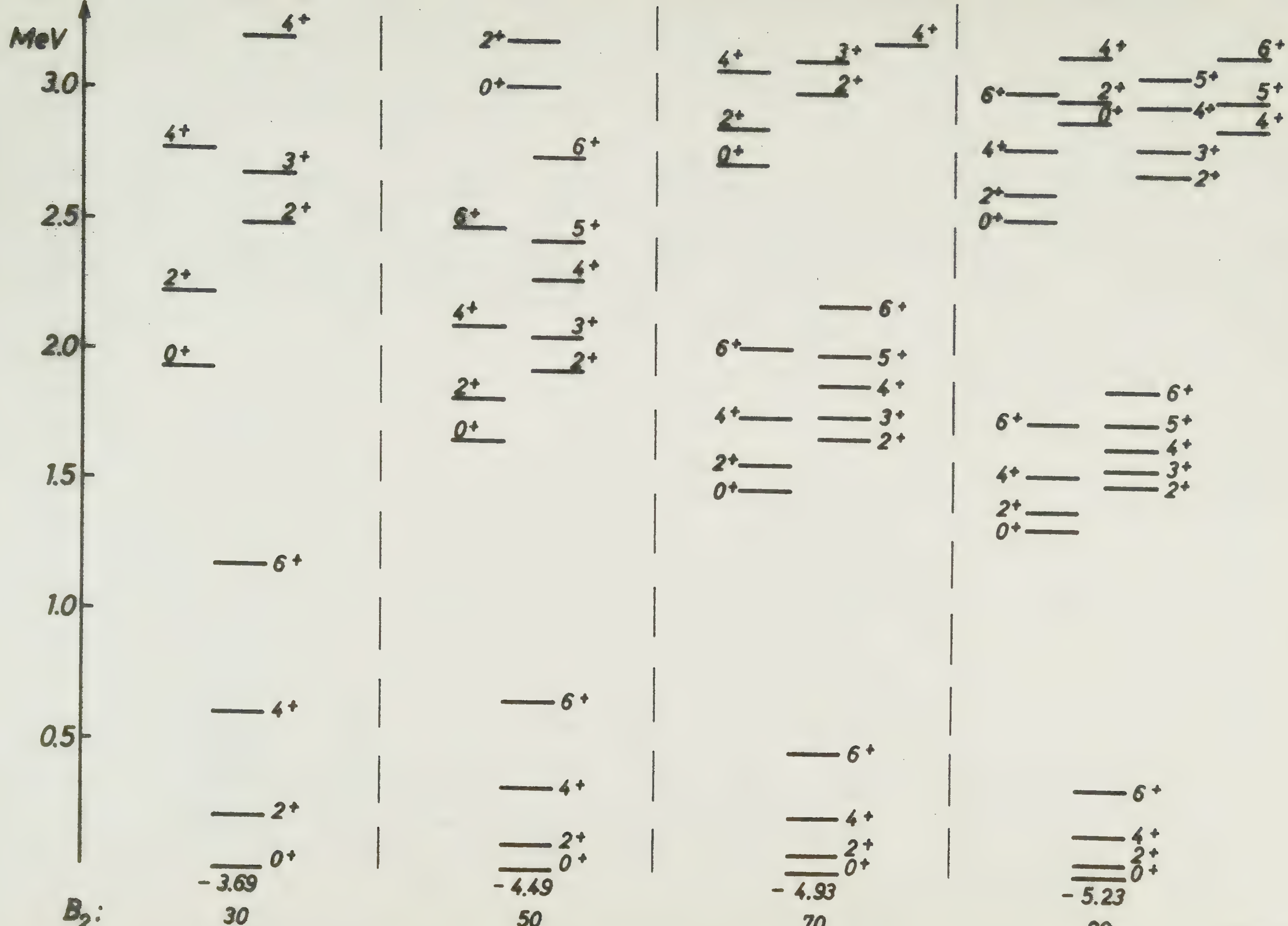
In der letzten Figur III.14 dieses Abschnitts ist nochmals die Lage der 0^+- und 2^+-Zustände der untersten Banden eines prolaten Kerns bei Variation von B_2 und P_3 aufgezeigt; doch zusätzlich ist herausgestellt, wie Radien und Quadrupolmomente durch die kinetische Energie modifiziert werden (stellvertretend bei den untersten drei 2^+-Niveaus).


Anharmonischer Vibrator
MeV
2.0
1.5
1.0
0.5
3+
6+
4+
0+
0+
2+
4+
2+
0+
5+
4+
2+
6+
2+
3+
6+
4+
0+
0+
2+
4+
2+
0+
5+
4+
2+
6+
0+
2+
4+
5+
4+
2+
6+
2+
3+
6+
4+
0+
0+
2+
4+
2+
0+
1.27
0.938
0.776
B2:
30
50
70

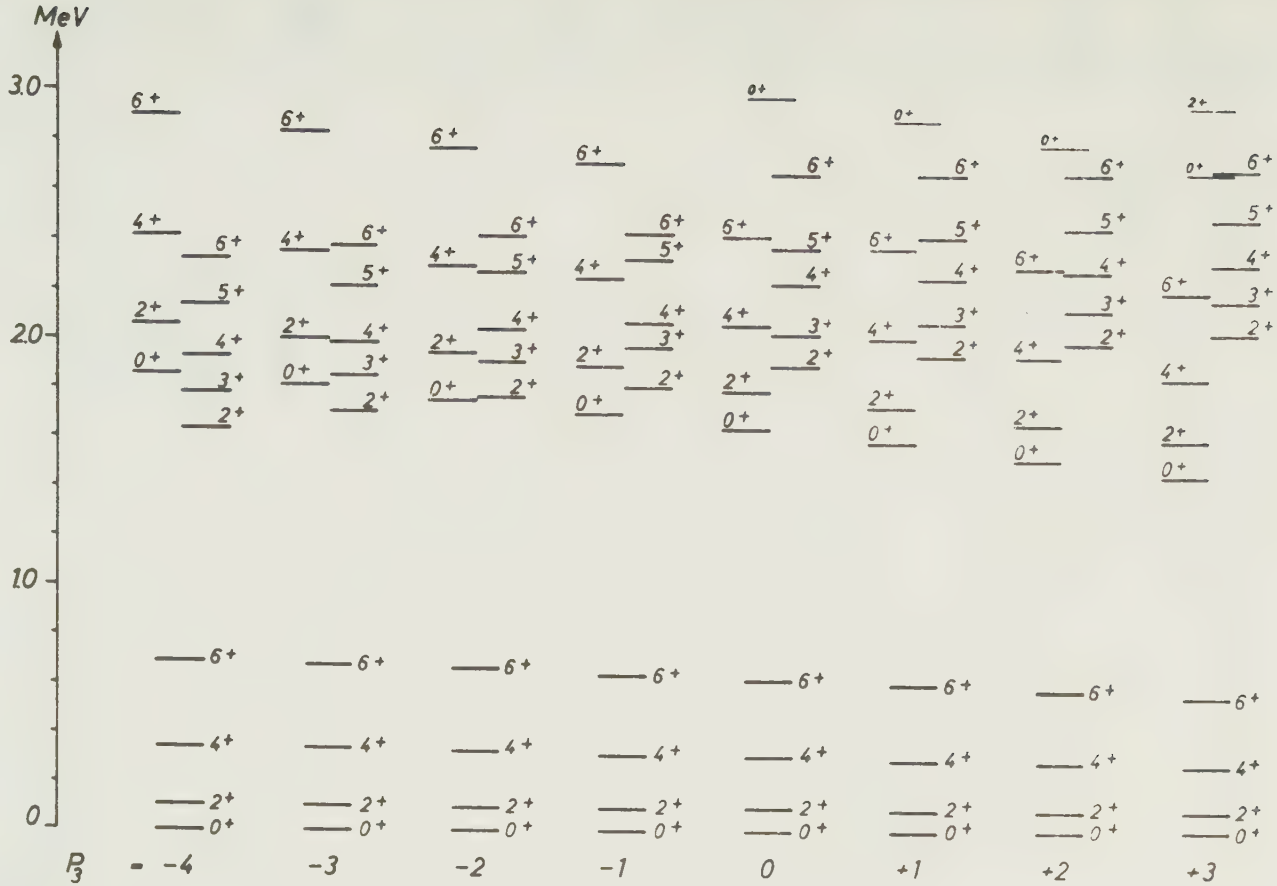
Figur III. 8


MeV
1.5
1.0
0.5
0.0
P_3 =
-10
-5
0
+5
+10
5^+ 6^+ 2^+ 4^+
2^+ 6^+ 3^+ 4^+ 0^+
0^+ 4^+ 2^+
2^+
0^+
2^+
3^+ 6^+ 4^+ 0^+
0^+
4^+ 2^+
2^+
0^+
2^+
3^+ 6^+ 4^+ 0^+
0^+
2^+ 4^+
2^+
0^+
2^+ 3^+ 0^+ 4^+ 6^+
0^+ 2^+ 4^+
2^+
0^+
2^+ 4^+ 0^+
0^+ 3^+ 4^+ 6^+ 2^+
2^+ 4^+ 0^+
2^+
0^+

Figur III.9

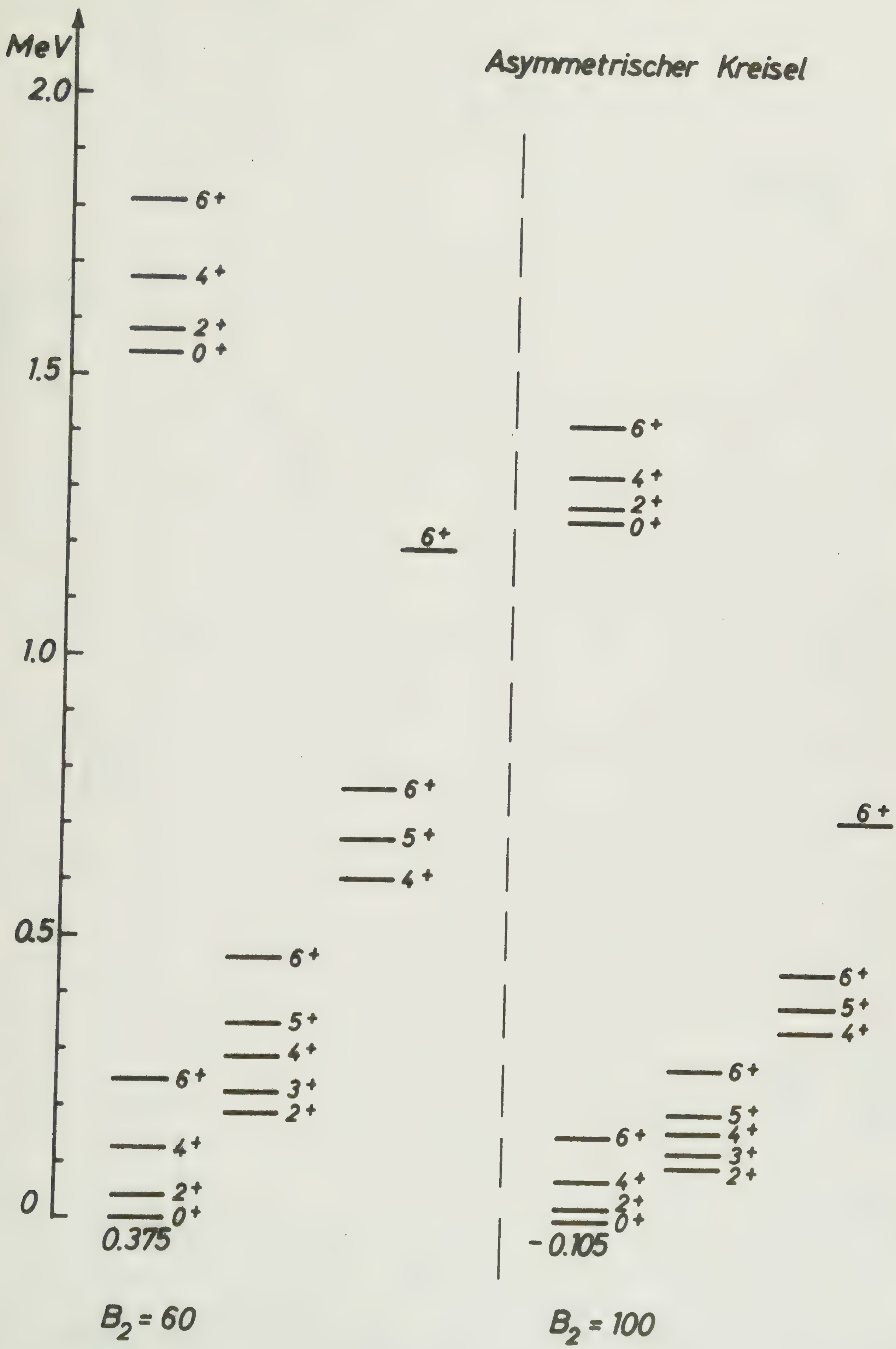


Figur III.10



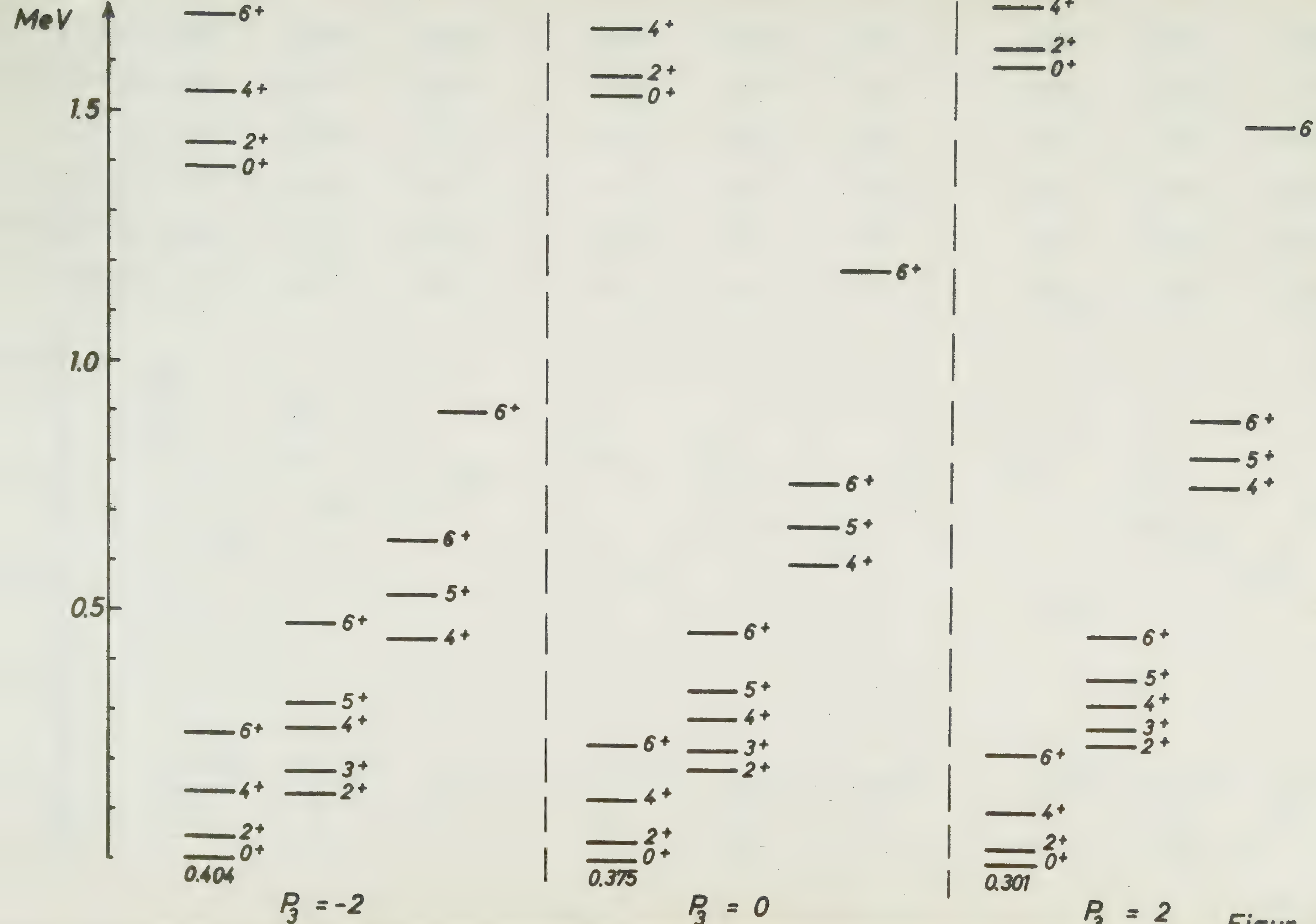
	P_3 = -4	-3	-2	-1	0	+1	+2	+3
$0^+(\beta) \rightarrow 2^+(\beta)$	3.72	3.66	3.51	2.65	3.58	3.83	3.86	3.89
$0^+(\beta) \rightarrow 2^+(\gamma)$	0.11	0.16	0.30	1.16	0.42	0.01	0.00	0.00
$2^+(\gamma) \rightarrow 3^+(\gamma)$	1.28	1.23	1.15	0.82	1.20	1.23	1.21	1.19
$2^+(\beta) \rightarrow 3^+(\gamma)$	0.04	0.08	0.10	0.44	0.05	0.00	0.00	0.01
$3^+(\gamma) \rightarrow 4^+(\gamma)$	0.89	0.86	0.81	0.66	0.52	0.71	0.76	0.78
$3^+(\gamma) \rightarrow 4^+(\beta)$	0.01	0.03	0.06	0.21	0.33	0.14	0.07	0.05

Figur III.11



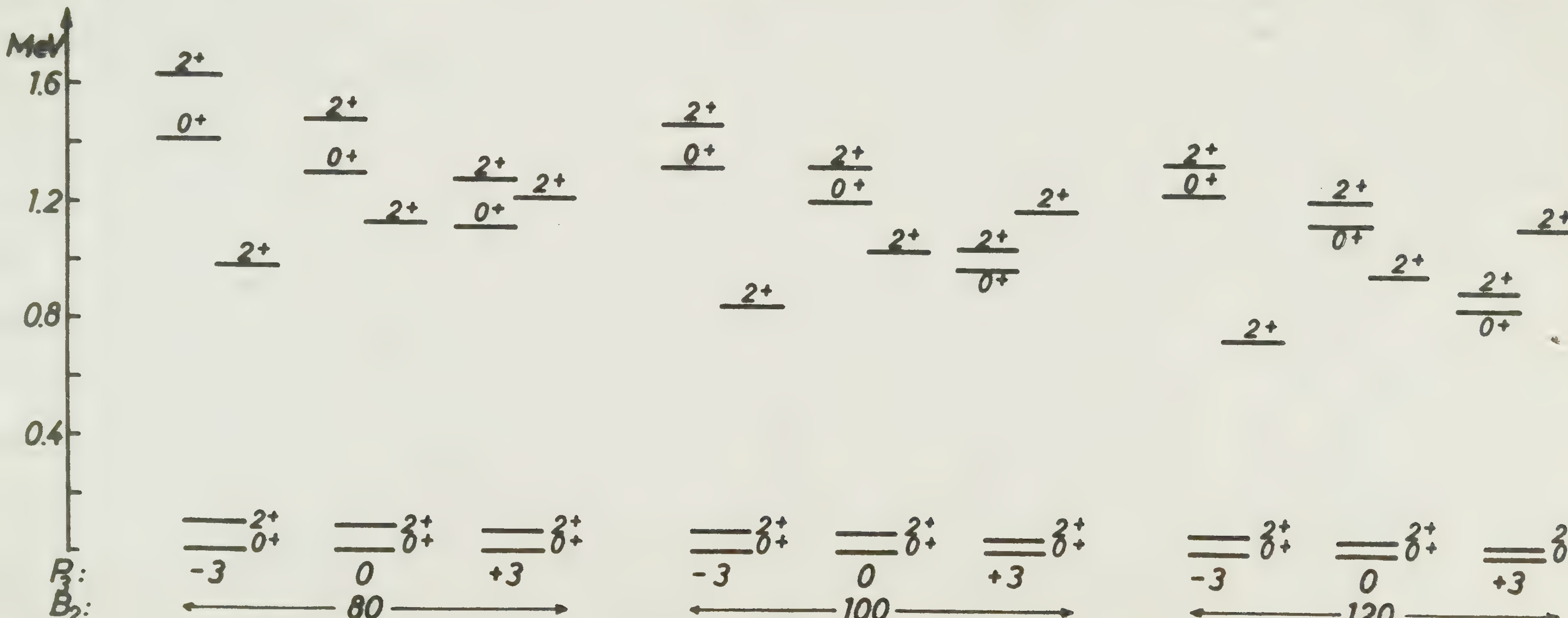
MeV
2.0
1.5
1.0
0.5
0
Asymmetrischer Kreisel
6+
4+
2+
0+
6+
4+
2+
0+
0.375
6+
5+
4+
3+
2+
6+
5+
4+
6+
6+
4+
2+
0+
-0.105
6+
5+
4+
3+
2+
6+
5+
4+
6+
B2 = 60
B2 = 100

Figur III.12



Figur III. 13

R	2⁺(3):	4.7258	4.7255	4.7240	4.7261	4.7256	4.7217	4.7271	4.7260	4.7224
	2⁺(2):	4.7244	4.7217	4.7224	4.7263	4.7230	4.7265	4.7280	4.7239	4.7276
	2⁺(1):	4.7289	4.7276	4.7270	4.7295	4.7280	4.7274	4.7302	4.7283	4.7278
Qu	2⁺(3):	-1.315	-1.440	-0.041	-1.413	-1.513	1.398	-1.488	-1.556	1.488
	2⁺(2):	1.538	1.477	-0.034	1.588	1.521	-1.491	1.625	1.550	-1.591
	2⁺(1):	-1.641	-1.622	-1.614	-1.666	-1.642	-1.633	-1.685	-1.655	-1.646



Figur III. 14

I. Kerntypen

Wir stellen jetzt zahlreiche Kerntypen vor: Zu Beginn die Dynamik der drei Extremfälle, die im Abschnitt II.C. hervorgehoben wurden und für die (näherungsweise) die alten Modelle zutreffen, anschließend realistischere Fälle. Ausgenommen sind vorerst Mischtypen mit 2 Minima, weil wir dieses Feld für so neu und wichtig halten, daß dafür ein eigner Abschnitt vorgemerkt wird.

1) Der harmonische Oszillator (Figur II.5): Das Spektrum und seine Klassifizierung sind aus Figur I.2 bekannt. Um den Grad der Sphärizität realistischer Fälle messen zu können, sind in Tabelle III.3 die Übergangswahrscheinlichkeiten bis N=3 und bis l=4 angegeben, die sofort aus Formel (III.31) und aus den berechneten reduzierten Matrixelementen folgen. Ausnahmsweise sind die Übergangswahrscheinlichkeiten in erster Ordnung und in Einheiten von $B(E2/0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ angeführt.
Nur B(E2)-Werte zwischen Zuständen mit $|\Delta N|=1$, $|\Delta v|=1$ und $|\Delta \ell| \leq 2$ verschwinden nicht.
Die Quadrupolmomente sind in erster Ordnung gleich Null. Die Radien sind beim harmonischen Oszillator vom Drehimpuls unabhängig und folgen allein aus der Phononenzahl N, genauer

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = const \sqrt{(2N+5)} \qquad \text{(III.39)}$$

wie man aus (III.36) schließt.

B(E2):	$2^+(1) \rightarrow 0^+(1)$	0.20	B(E2):	$2^+(3) \rightarrow 2^+(2)$	0.11
	$0^+(2) \rightarrow 2^+(1)$	0.40		$3^+(1) \rightarrow 2^+(2)$	0.43
	$2^+(2) \rightarrow 2^+(1)$	0.40		$4^+(2) \rightarrow 2^+(2)$	0.31
	$4\ (1) \rightarrow 2^+(1)$	0.40		$2^+(3) \rightarrow 4^+(1)$	0.21
	$2^+(3) \rightarrow 0^+(2)$	0.28		$3^+(1) \rightarrow 4^+(1)$	0.17
	$0^+(3) \rightarrow 2^+(2)$	0.60		$4^+(2) \rightarrow 4^+(1)$	0.26

Tabelle III.3

2) Sehr stark deformierter achsialsymmetrischer Rotator (Figur III.15): Ein solcher Kerntyp liegt ungefähr den bisherigen Rotationsmodellen zugrunde, obwohl man dort nicht an Hand von kollektiven Potentialflächen argumentiert. Entscheidend für die Gültigkeit der Rotationsmodelle sind nämlich erstens eine sehr stabile Kerngestalt, wie sie hier durch die große Tiefe des Minimums angezeigt wird und zweitens der parabelähnliche Anstieg an der Stelle des Minimums.
Kurz einige Maßstäbe aus dem alten Rotationsmodell [24], an denen wir uns über die "Reinheit" der Rotationen bei realistischen Kernen orientieren können.

$$E_I = \frac{\hbar}{2\Theta} I(I+1) \qquad \text{Energien innerhalb einer Bande} \qquad \text{(III.40)}$$

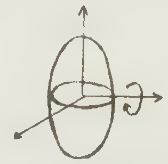
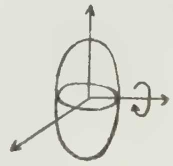
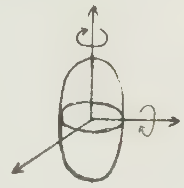
$$Q = \frac{3K^2 - I(I+1)}{(I+1)(2I+3)} Q_0 \qquad \text{wobei } Q_0 \text{ das konstante innere Quadrupolmoment ist} \qquad \text{(III.41)}$$

$$B(E2/I+2 \rightarrow I) = \frac{15}{32\pi} e^2 Q_0^2 \frac{(I+1)(I+2)}{(2I+3)(2I+5)} \qquad \text{(III.42)}$$

In Figur III.16 erkennen wir eine Menge wohlgestalteter Rotationsbanden, die zur kollektiven Potentialfläche der Figur III.15 gehören. Es erscheinen genau die Banden (man erkennt es an den Abständen der Bandenköpfe), die das Rotations-Vibrations-Modell von Faessler und Greiner [27] voraussagt. Rechts sind deshalb die einzelnen Banden mit den Quantenzahlen gekennzeichnet, die im Rot-Vib-Modell benutzt werden.

In Tabelle III.4 sind einige andere dynamische Eigenschaften der Niveaus zusammengestellt. Die Vorzeichen der Quadrupolmomente sollen mit den kleinen Skizzen (rechts in der Tabelle) plausibel gemacht werden. Bekanntlich haben Zigarren positives, Diskusse negatives Quadrupolmoment. Die Grund- und β-Bande entstehen durch fortgesetzt schnellere Rotationen um die waagerechte Achse; denn vom Laborsystem ausgesehen entstehen durch diese Rotationen diskusförmige Gebilde. Der 2^+-Kopf der γ-Bande ist die Erzeugung einer Asymmetrie verbunden mit einer Rotation um die senkrechte Achse, die dann keine Symmetrieachse mehr ist. Die höheren Mitglieder der γ-Bande entstehen dadurch, daß sich der

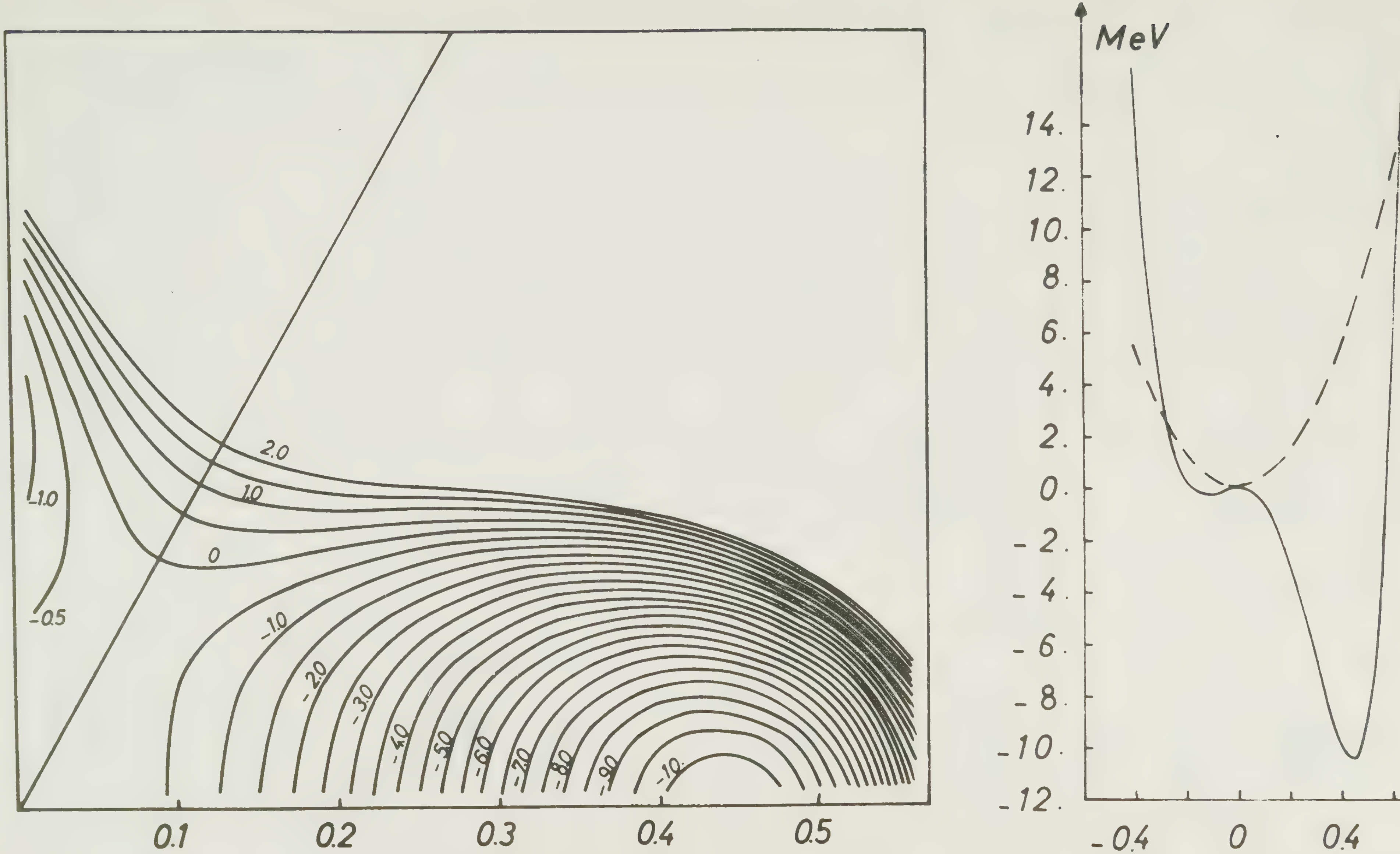
Rotation des Bandenkopfes um die senkrechte Achse schrittweise schnellere Rotationen um die waagerechte Achse überlagern. Beim 3^+-Zustand ist nach außen Kugelsymmetrie sichtbar, beim 4^+-Zustand überwiegt dann schon die Rotation um die waagerechte Achse, so daß das Vorzeichen des Quadrupolmoments umklappt.

		Quadrupolmomente	Radien	
Grundbande	0^+	0.	4.8100	
	2^+	-2.488	4.8104	
	4^+	-3.173	4.8114	
β - Bande	0^+	0.	4.7947	
	2^+	-2.320	4.7955	
	4^+	-2.959	4.7972	
γ - Bande	2^+	2.396	4.8044	
	3^+	0.	4.8049	
	4^+	-1.183	4.8056	

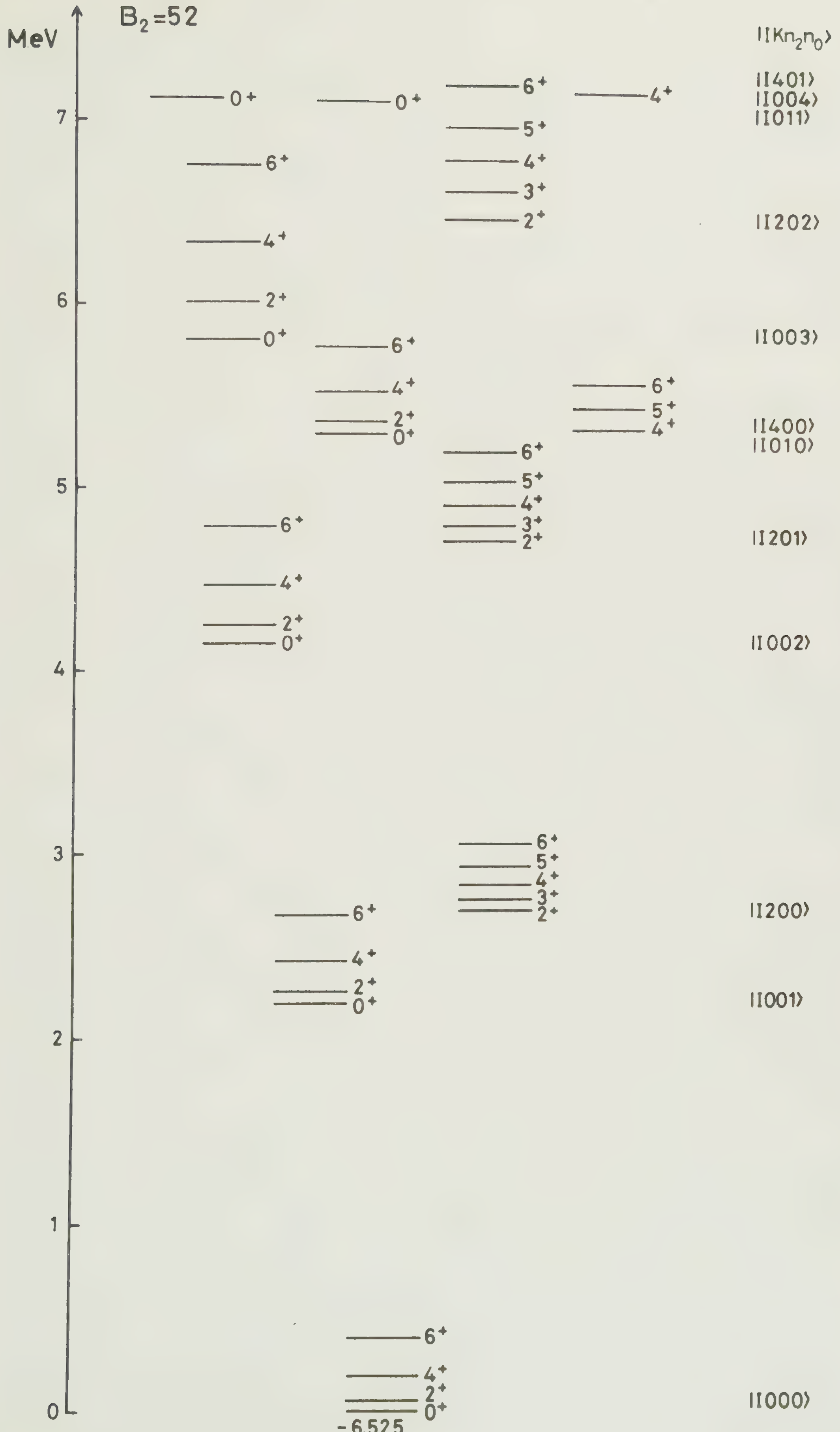
B(E2)-Übergangswahrscheinlichkeiten:

$2^+(g)\to 0^+(g)$	1.508	$2^+(\beta)\to 0^+(g)$	0.020
$4^+(g)\to 2^+(g)$	2.166	$4^+(\beta)\to 2^+(g)$	0.024
$2^+(\beta)\to 0^+(\beta)$	1.311	$2^+(\gamma)\to 0^+(g)$	0.011
$4^+(\beta)\to 2^+(\beta)$	1.894	$4^+(\gamma)\to 2^+(g)$	0.006
$3^+(\gamma)\to 2^+(\gamma)$	1.409	$2^+(\gamma)\to 0^+(\beta)$	0.0004
$4^+(\gamma)\to 3^+(\gamma)$	1.049	$3^+(\gamma)\to 2^+(\beta)$	0.0016
$4^+(\gamma)\to 2^+(\gamma)$	0.839	$4^+(\gamma)\to 2^+(\beta)$	0.0003

Tabelle III.4


2.0
1.0
0
-1.0
-0.5
-1.0
-2.0
-3.0
-4.0
-5.0
-6.0
-7.0
-8.0
-9.0
-10.
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
MeV
14.
12.
10.
8.
6.
4.
2.
0.
-2.
-4.
-6.
-8.
-10.
-12.
-0.4
0
0.4

Figur III.15

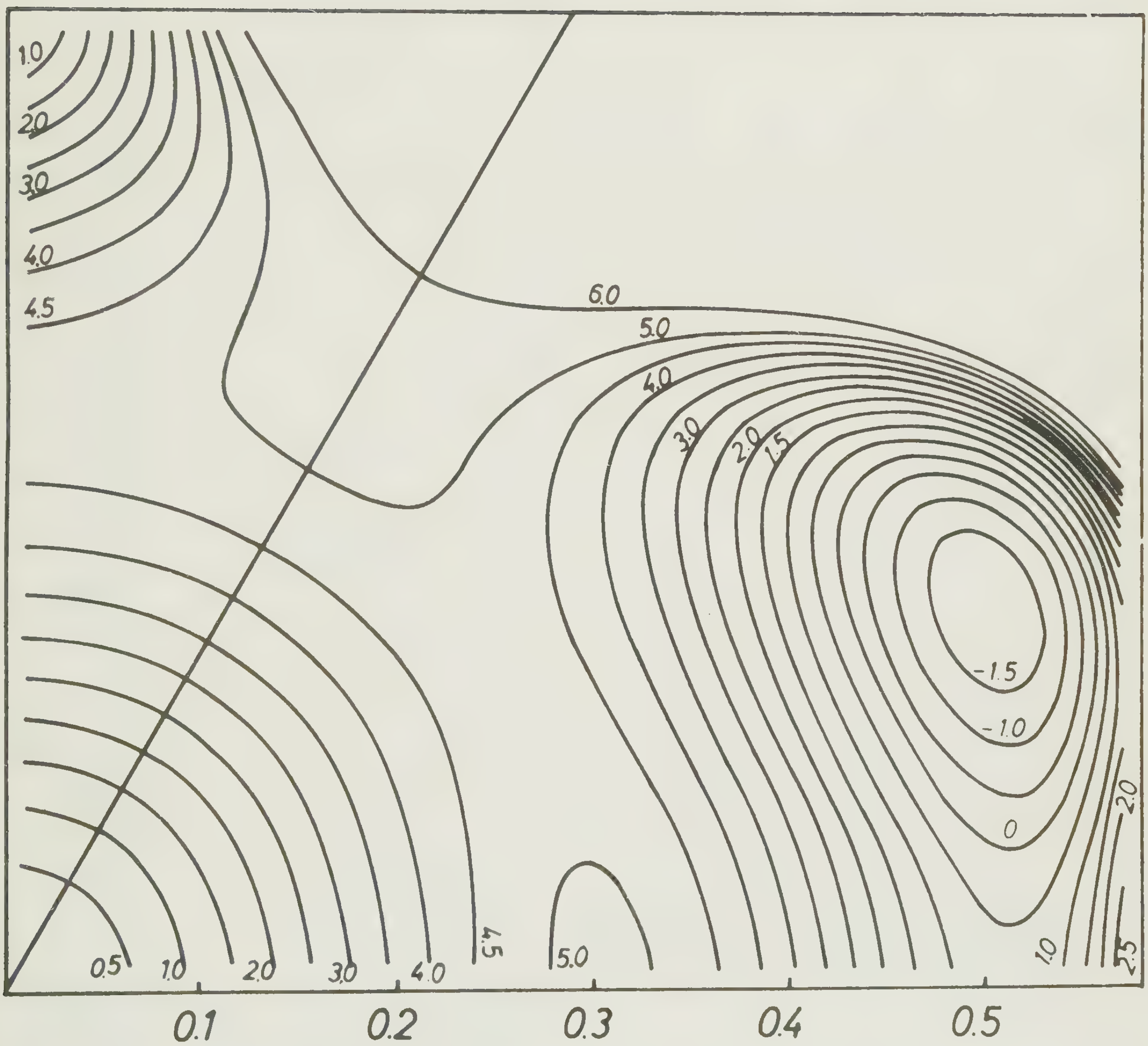

MeV
$B_2 = 52$
$|IKn_2n_0\rangle$
|I401⟩
|I004⟩
|I011⟩
|I202⟩
|I003⟩
|I400⟩
|I010⟩
|I201⟩
|I002⟩
|I200⟩
|I001⟩
|I000⟩
- 6.525

Figur III.16

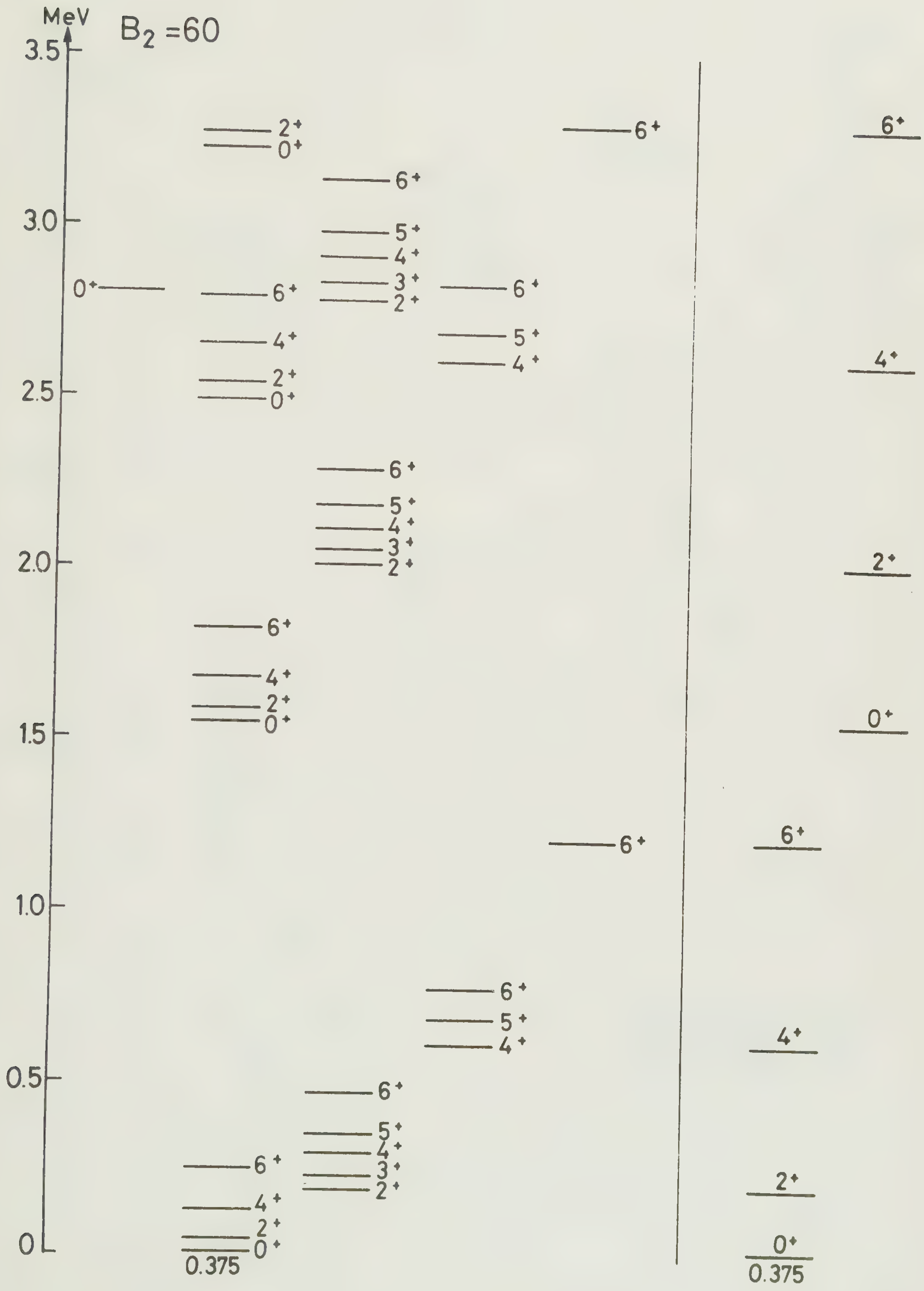
3) In Figur III.17 sehen wir die kollektive Potentialfläche eines asymmetrischen Kreisels mit einem Minimum bei $\gamma = 20^{\circ}$. Das Spektrum erscheint in Figur III.18. Kennzeichnend für dreiachsiale Kerne sind die tiefliegenden γ-Banden. Der aus dem Rahmen fallende 0^{+}-Zustand ganz links bei 2.8 MeV ist sphärischer Natur. Sehr deutlich tritt in dieser Studie der Charakter der Bandenköpfe zutage. Die Bandenköpfe sind keine Vibrationen sondern ebenfalls Rotationen, nur um eine andere Achse. Rechts im Bild sind die Bandenköpfe für sich aufgetragen, die ihrerseits dem I(I+1)-Gesetz gehorchen.

Weitere dynamische Eigenschaften sind in Figur III.19 angeführt. Die Skizzen illustrieren die Art der Rotation in den einzelnen Zuständen, die man aus den Quadrupolmomenten (rechts neben den Niveaus) erschließt. Die großen Kreisel beziehen sich auf die Bandenköpfe, die kleinen auf die darauf aufbauenden Banden. Die Anzahl der Pfeile an den Achsenenden deuten, klassisch gesprochen, die Rotationsgeschwindigkeit um diese Achsen an. 0^{+}-Zustände haben im Laborsystem stets Quadrupolmoment 0, d.h. alle Orientierungen des Kerns kommen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vor. Der 2^{+}-Zustand der Grundbande hat negatives Quadrupolmoment. Der Kern rotiert somit um die hier waagerechte Achse; denn von außen gesehen entsteht durch diese Rotation ein diskusförmiges Gebilde. Wir rechnen, wie erwähnt, alle dynamischen Größen im Laborsystem aus. Der 4^{+}-Zustand ist eine schnellere Rotation um dieselbe Achse; denn das Quadrupolmoment ist ebenfalls negativ. Der 2^{+}-Kopf der ersten γ-Bande hat positives Quadrupolmoment. Das zeigt eine Rotation um die hier senkrechte Achse an. Vom Laborsystem aus gesehen entsteht nämlich durch eine Rotation um die senkrechte Achse ein zigarrenartiges Gebilde. Dieser Rotation des Bandenkopfes überlagern sich nun in gequantelter Form die Rotationen um die waagerechte Achse und erzeugen dadurch die gesamte Bande. Beim 3^{+}-Niveau überlagern sich beide Rotationen derart, daß nach außen Kugelsymmetrie des Kerns resultiert. Beim 4^{+}-Zustand überwiegt dann schon die Rotation um die waagerechte Achse in dem Sinne, daß nach außen ein Diskus sichtbar ist, also das Quadrupolmoment zum Negativen umkippt.

Die ausgedehnte Bande der Bandenköpfe entsteht durch Rotationen um die Achse des kleinsten Trägheitsmoments und die engen Banden durch Rotationen um die Achse des größten Trägheitsmoments. Vergeblich sucht man hier nach einem dritten Typ von Rotationen, den man zunächst er-

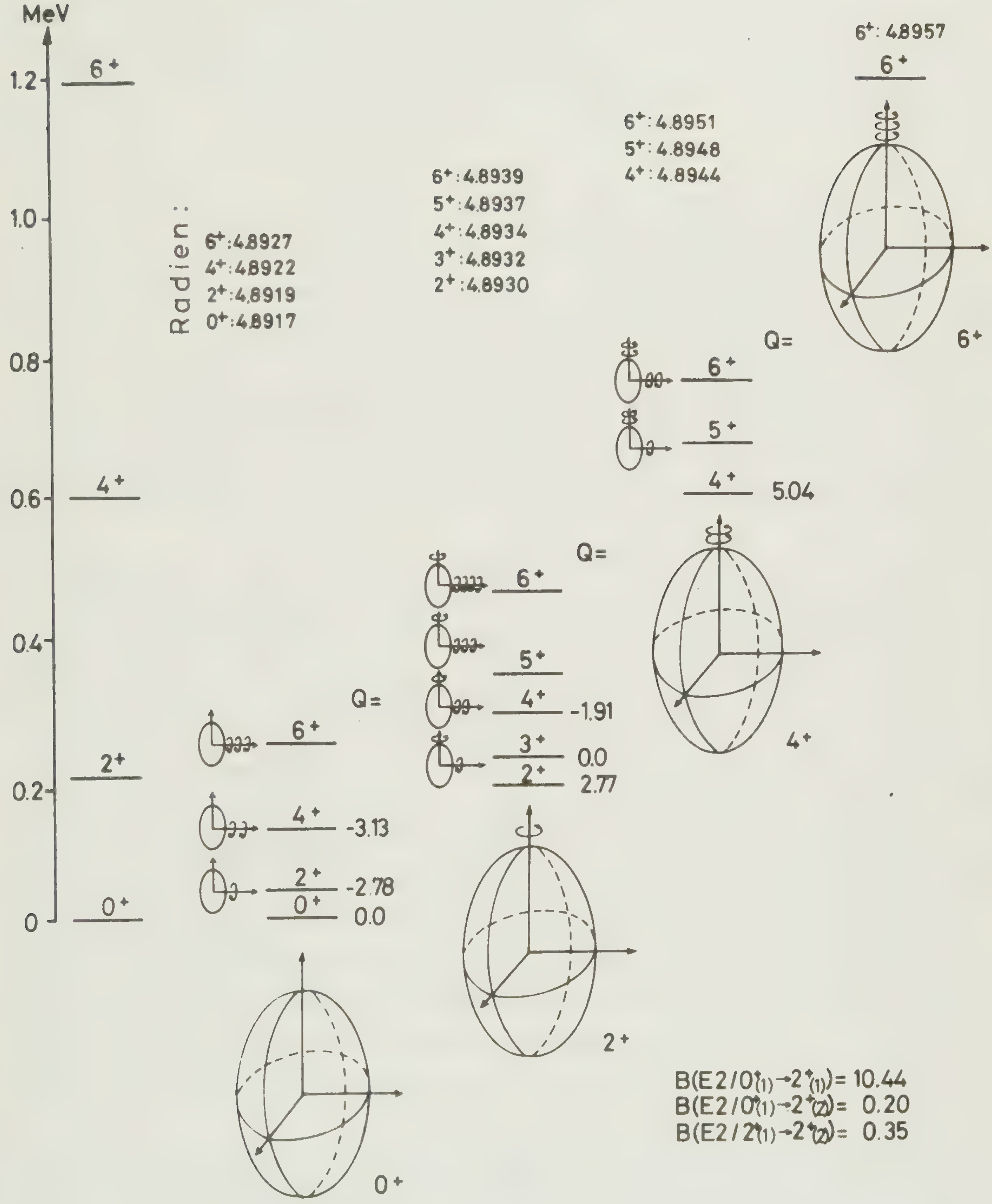

1.0
2.0
3.0
4.0
4.5
6.0
5.0
4.0
3.0
2.0
1.5
-1.5
-1.0
0
2.0
1.0
2.5
0.5
1.0
2.0
3.0
4.0
4.5
5.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5

Figur III.17



MeV
B2 =60
3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0
0⁺
2⁺
0⁺
6⁺
4⁺
2⁺
0⁺
6⁺
4⁺
2⁺
0⁺
6⁺
4⁺
2⁺
0⁺
0.375
6⁺
5⁺
4⁺
3⁺
2⁺
6⁺
5⁺
4⁺
3⁺
2⁺
6⁺
5⁺
4⁺
3⁺
2⁺
6⁺
5⁺
4⁺
6⁺
5⁺
4⁺
6⁺
6⁺
6⁺
4⁺
2⁺
0⁺
0.375
6⁺
4⁺
2⁺
0⁺

Figur III.18


MeV
1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0
6+
4+
2+
0+
Radien:
6+:4.8927
4+:4.8922
2+:4.8919
0+:4.8917
6+:4.8939
5+:4.8937
4+:4.8934
3+:4.8932
2+:4.8930
6+:4.8951
5+:4.8948
4+:4.8944
6+:4.8957
Q=
-3.13
-2.78
0.0
-1.91
0.0
2.77
5.04
B(E2/0+(1)→2+(1))= 10.44
B(E2/0+(1)→2+(2))= 0.20
B(E2/2+(1)→2+(2))= 0.35

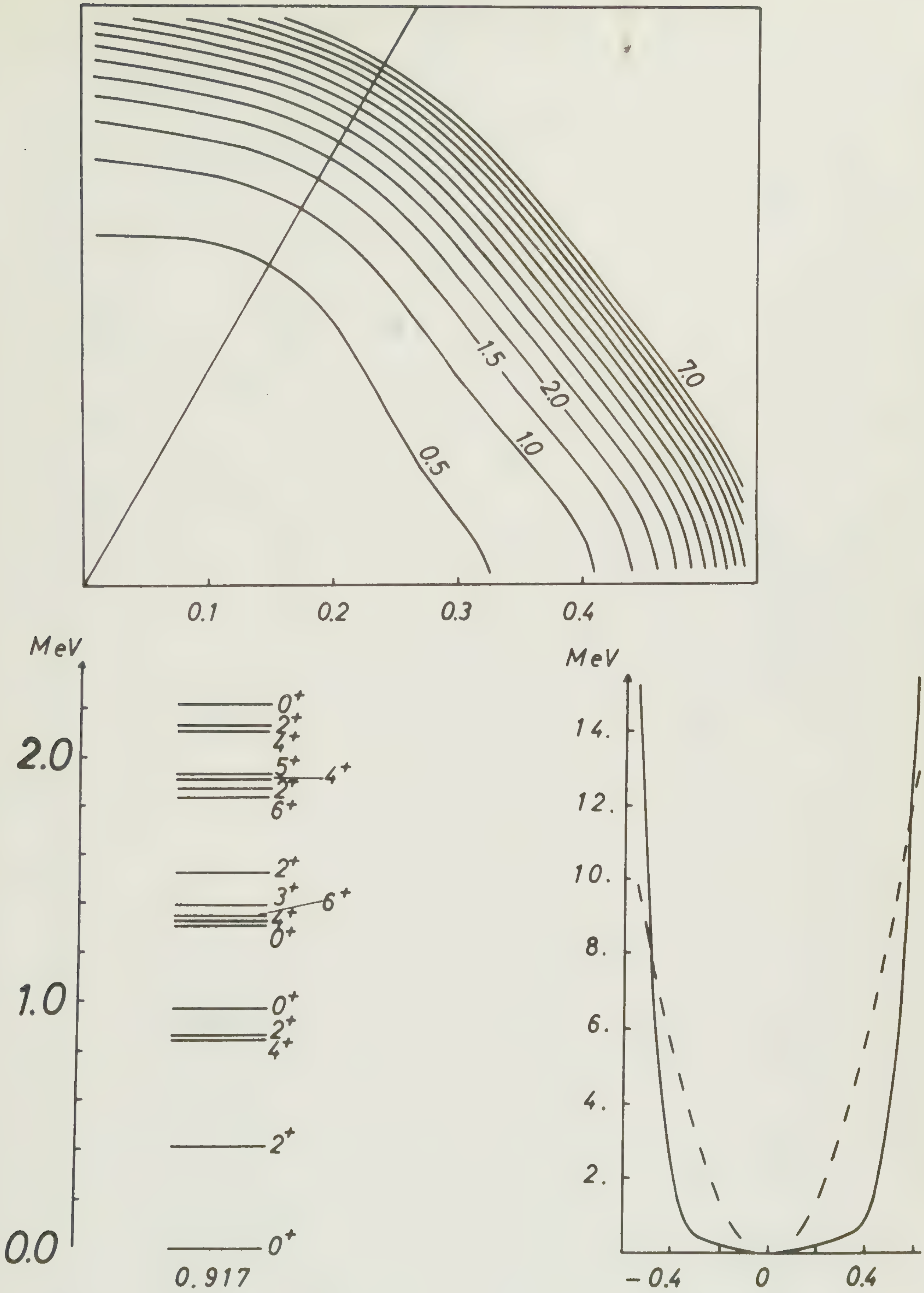
Figur III. 19

wartet, weil ja schließlich ein Kreisel mit drei verschiedenen Achsen vorliegt. Aber so wie in der klassischen Mechanik nur die größte und kleinste der drei freien Achsen eines Körpers stabil sind, liefern offensichtlich auch quantenmechanisch nur die Rotationen um die größte und kleinste der Hauptträgheitsachsen stationäre Zustände, also Energieniveaus.

Diese drei Beispiele sollten demonstrieren, daß unser Modell die wichtigsten der bisherigen Modelle, nämlich das Vibrationsmodell, das Rotationsmodell und das Davydow-Modell, als Spezialfälle enthält, wobei wir aber die Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Freiheitsgraden voll in Betracht ziehen, und wobei wir die bisher übliche Verwendung von Intrinsic-Koordinaten und die dadurch bedingte Aufspaltung des Hamilton-Operators in einen Rotationsanteil und einen Vibrationsanteil vermeiden. Es folgen nun weitere realistischere Kerntypen.

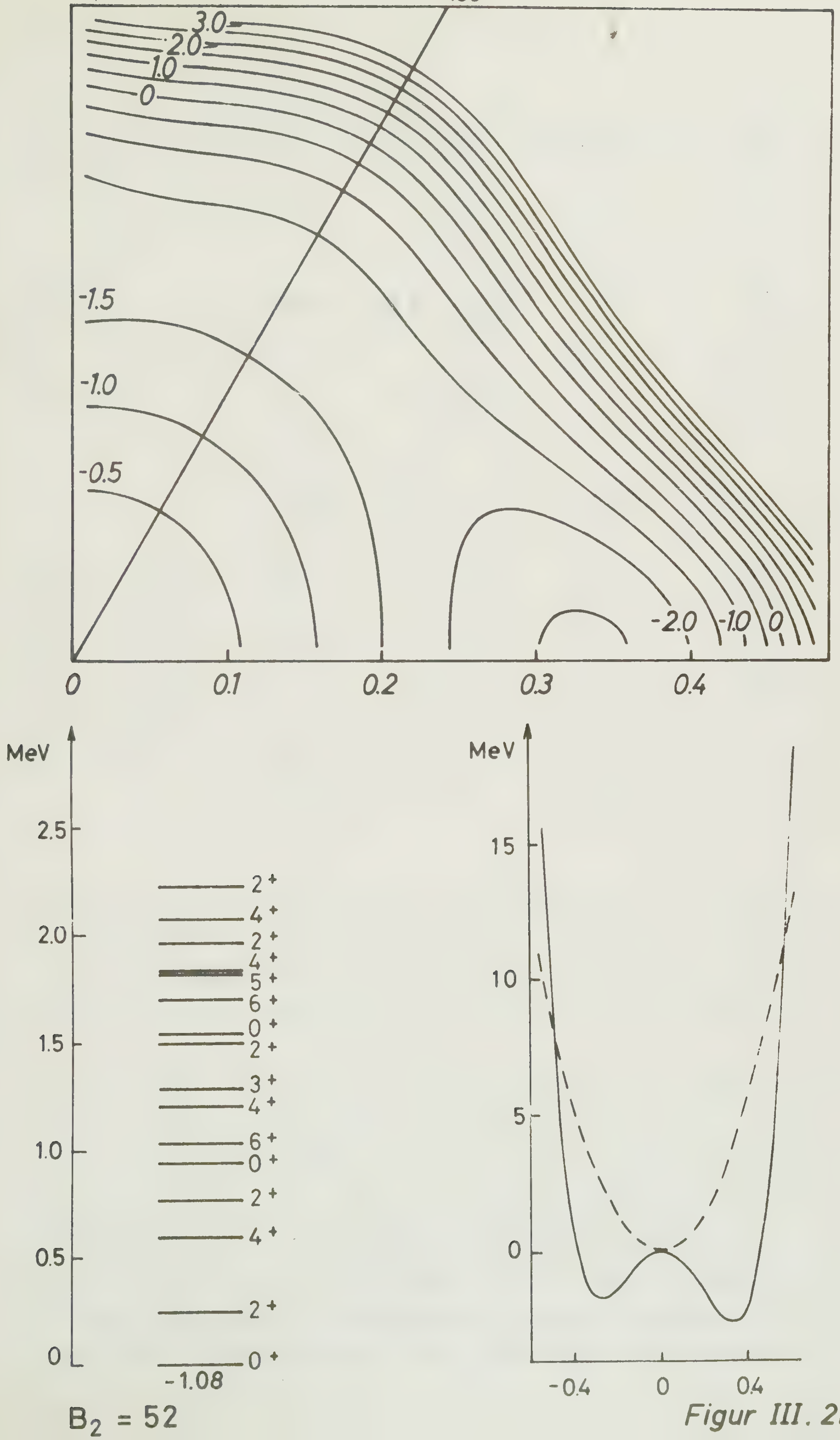
4) Figur III.20 zeigt die kollektive Potentialfläche, den Schnitt und das Spektrum eines anharmonischen Vibrators. Die gestrichelte Linie deutet immer den Basis-Oszillator an, der für die Diagonalisierung benutzt wurde. Wie in Abschnitt III.B. diskutiert, läßt aber die Oszillator-Parabel keine Rückschlüsse auf die Reichweite der Basiszustände oder auf die Energie der Phononen zu. In Figur III.20 sind die Entartungen der Niveaus durch die Anharmonizitäten des Potentials aufgehoben; doch die Multiplett-Struktur ist klar wiederzuerkennen. In Tabelle III.5 sind weitere dynamische Größen des anharmonischen Vibrators notiert. Die beträchtlichen Quadrupolmomente der angeregten Zustände (und übrigens auch ihr Spin) lassen sich durch Rotationen in Form wandernder Wellen leichter deuten als durch Vibrationen, deren Schwingungsbild fest stehenbleibt. In diesem Bilde sind nur die 0^+-Niveaus als echte Vibrationen anzusehen.

5) Die Eigenschaften eines Übergangskerns zwischen dem sphärischen und deformierten Bereich sind in Figur III.21 und Tabelle III.6 zusammengefaßt. Das Spektrum weist, wie erwartet, weder eine saubere Multiplett-Struktur noch eine ausgeprägte Banden-Struktur auf.



$B_2 = 52$

Figur III.20



$B_2 = 52$

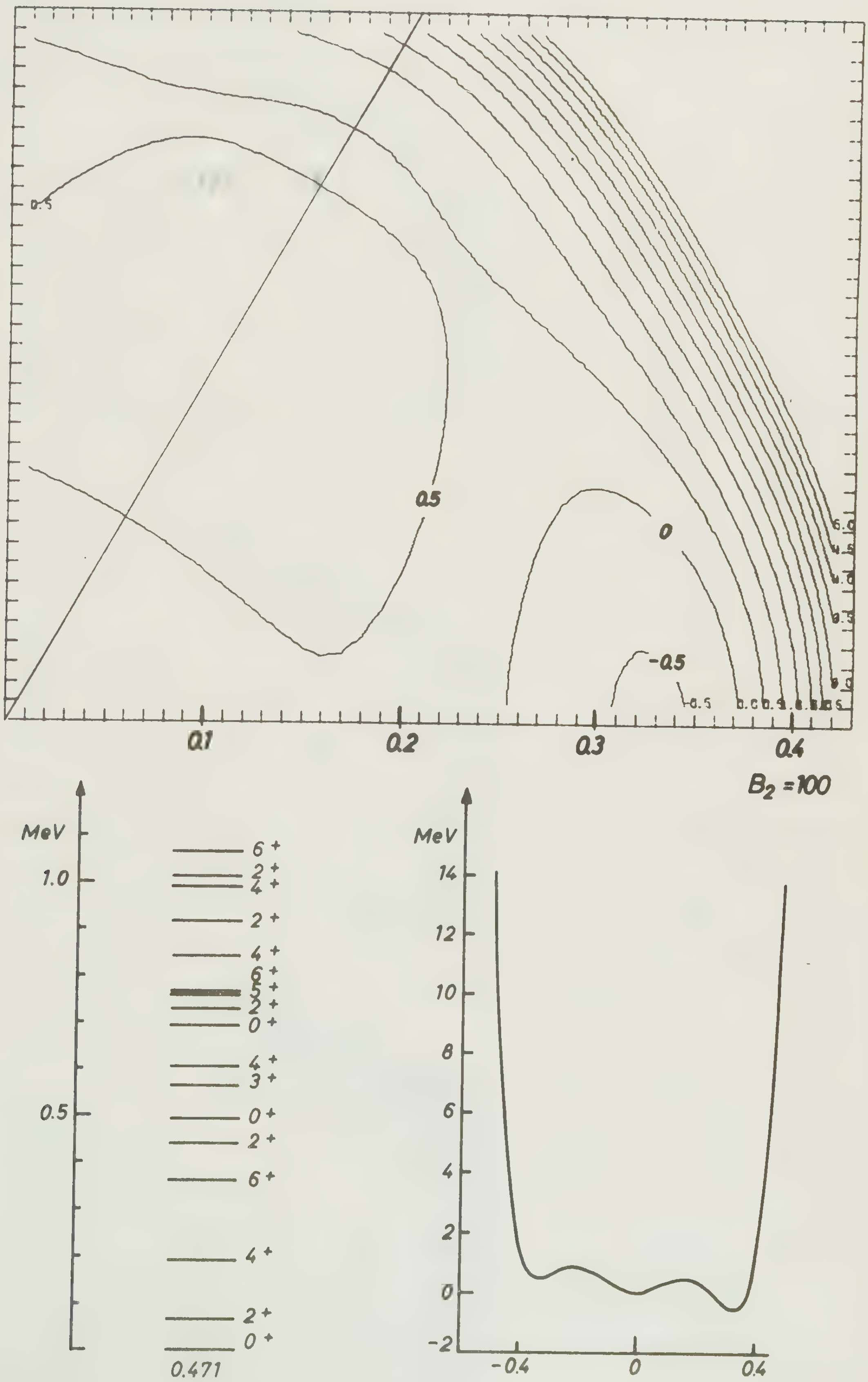
Figur III. 21

	Quadrupolmomente	Radien	Quadrupolmomente	Radien
$0^+(1)$	0.	4.6961	0.	4.7173
$2^+(1)$	-0.279	4.7103	-1.204	4.7247
$0^+(2)$	0.	4.7148	0.	4.7290
$2^+(2)$	0.077	4.7217	0.908	4.7216
$4^+(1)$	-0.582	4.7225	-1.628	4.7315
$0^+(3)$	0.	4.7297	0.	4.7117
$2^+(3)$	-0.539	4.7245	-0.928	4.7332
$3^+(1)$	0.	4.7296	0.	4.7277
$4^+(2)$	-0.172	4.7324	0.341	4.7274
	B(E2)-Werte		B(E2)-Werte	
	1.Ordnung	2.Ordnung	1.Ordnung	2.Ordnung
$2^+(1)\rightarrow 0^+(1)$	0.362	0.368	0.484	0.543
$0^+(2)\rightarrow 2^+(1)$	0.488	0.541	0.220	0.334
$2^+(2)\rightarrow 2^+(1)$	0.652	0.654	0.409	0.387
$4^+(1)\rightarrow 2^+(1)$	0.659	0.679	0.777	0.889
$0^+(2)\rightarrow 2^+(2)$	0.128	0.229	0.963	0.968
$2^+(2)\rightarrow 4^+(1)$	0.008	0.023	0.005	0.015

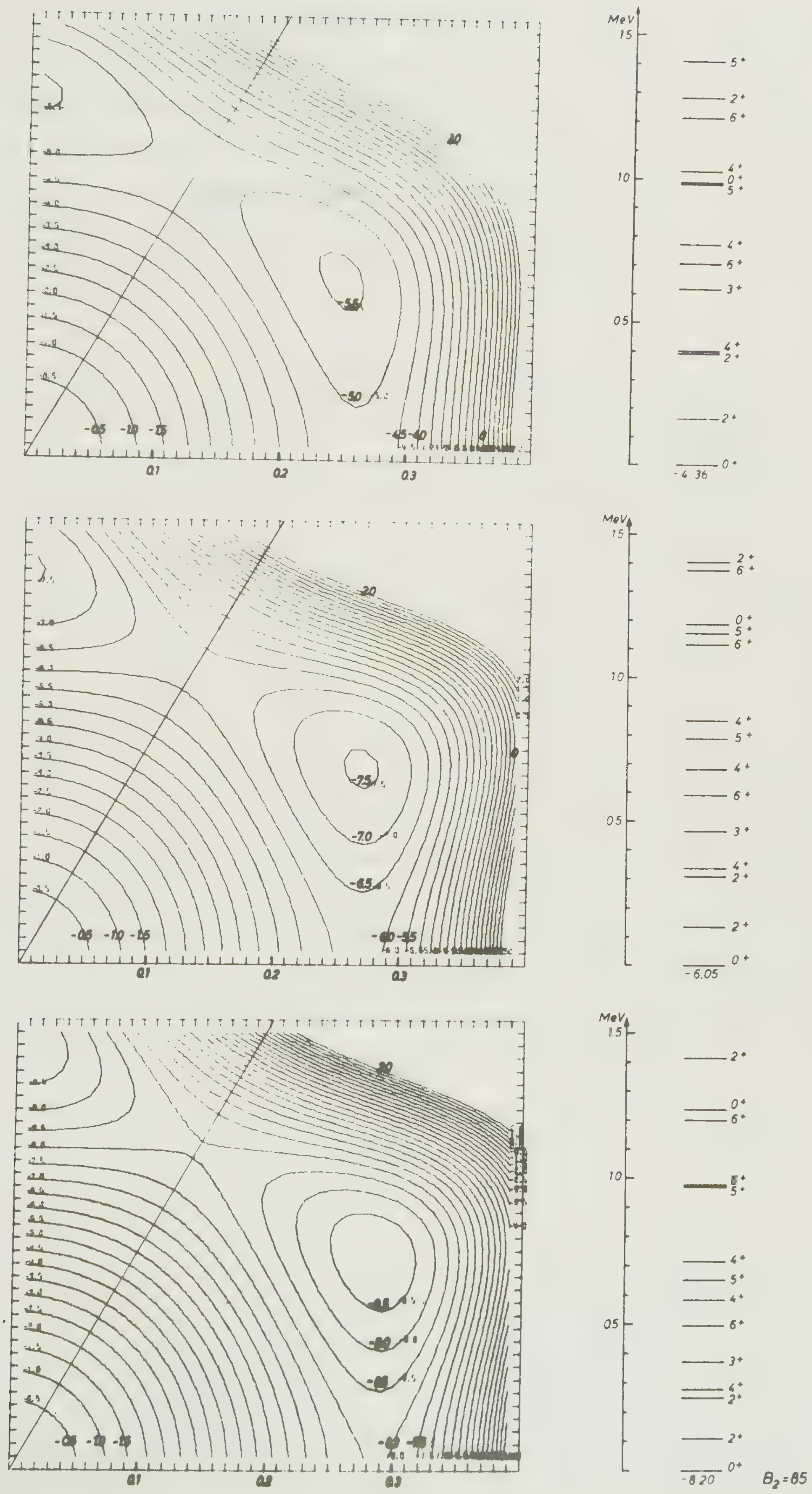
Tabelle III.5 Tabelle III.6

6) Nur geringe Höhenunterschiede weist die kollektive Potentialfläche der Figur III.22 bis zu Deformationen von $\beta = 0.4$ auf, um dann plötzlich steil anzusteigen. In diesem kastenartigen Potential hat sich eine zwar stark gestörte aber doch unverkennbare Bandenstruktur ausgebildet.

7) Während die Fläche der Figur III.17 von $\beta = 0$ aus gesehen zunächst ansteigt, bevor sie im Asymmetrischen das tiefste Minimum annimmt, verlieren die drei kollektiven Potentialflächen der Figur III.23 sofort an Höhe. Entlang $\gamma = 30^\circ$ zieht sich bei dieser Klasse von Flächen ein flaches Tal hin. Die Minima haben gegenüber dem Ursprung eine beträchtliche Tiefe, aber in γ-Richtung steigen sie nur geringfügig an. Letzteres ist sicherlich der Grund dafür, daß in den zugehörigen Spektren die Rotationsbanden des asymmetrischen Kreisels nur ganz leicht angedeutet sind. Den Spektren sieht man viel eher die weitgehende γ-Unab-


0.5
0.5
0
-0.5
0.1
0.2
0.3
0.4
B₂ =100
MeV
1.0
0.5
6 +
2 +
4 +
2 +
4 +
6 +
5 +
2 +
0 +
4 +
3 +
0 +
2 +
6 +
4 +
2 +
0 +
0.471
MeV
14
12
10
8
6
4
2
0
-2
-0.4
0
0.4

Figur III.22

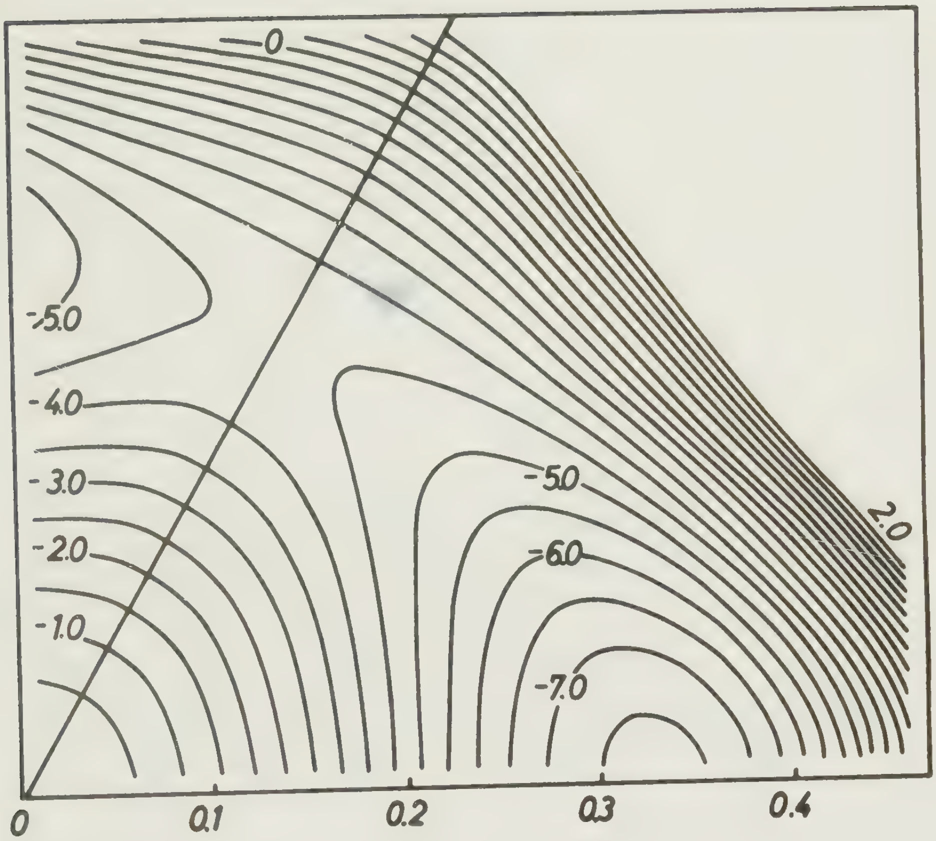


Figur III.23

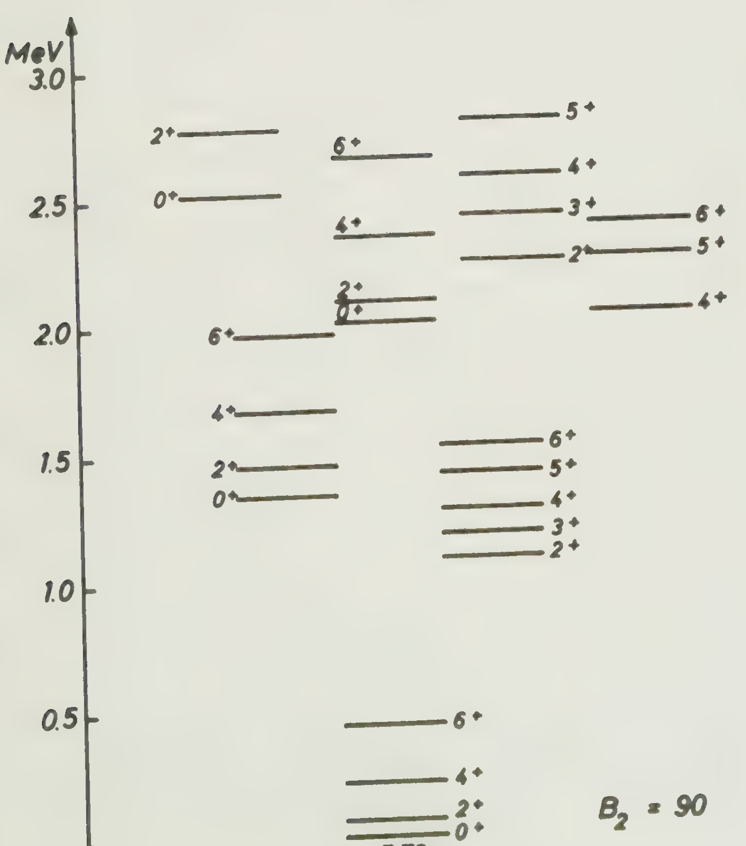
hängigkeit der Flächen an: in γ-unabhängigen Potentialen sind die Zustände $2^+, 4^+$ des ursprünglichen Tripletts entartet, und der 0^+-Zustand ist (auf Grund unterschiedlicher Seniorität) weit nach oben gestoßen (vergleiche mit Figur III.37 im Abschnitt III.K.). Bemerkenswert weiterhin, daß in allen Fällen der zweite 2^+-Zustand unter dem ersten 4^+-Zustand liegt. Mehrere Kerne wie die Ba-Isotope, die man gemeinhin zu den sphärischen zählt, haben Spektren dieser Struktur [35] . Es ist möglich, daß das bisher fehlende 0^+-Mitglied des Tripletts gar nicht existiert, weil in Wirklichkeit Kerne des Typs vorliegen, wie sie die Figur III.23 zeigt.

8) Die kollektive Potentialfläche, der Schnitt und das Spektrum eines prolaten Kerns mit $E_\beta > E_\gamma$ sind in Figur III.24 zusammengestellt. Das linke "Minimum", das im Schnitt zu sehen ist, erweist sich beim Betrachten der Gesamtfläche als Sattelpunkt, ist also gar kein Minimum.

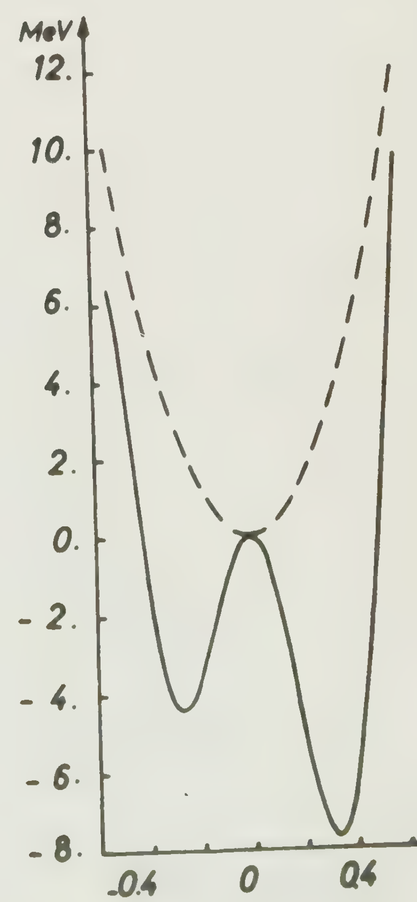
9) Durch Umkehrung der Vorzeichen von C_3 und C_5 erreicht man die Spiegelung der kollektiven Potentialflächen an der 30° - Achse. Figur III.25 zeigt zwei solcherart zueinander spiegelbildliche Flächen. Ihre Spektren sind stets identisch. Ein Beispiel dafür findet man in den Figuren III.26 und III.27. Wegen des starken Anstiegs der Fläche in γ-Richtung an der Stelle des Minimums liegt die γ-Bande über der β-Bande. Die Tabelle III.7 enthält einige weitere dynamische Größen des prolaten Kerns. Der gespiegelte oblate Kern hat in 1.Näherung dieselben Übergangswahrscheinlichkeiten und Radien und bis auf das Vorzeichen auch exakt dieselben Quadrupolmomente. Erst in 2.Näherung treten Abweichungen bei den B(E2)-Werten und Quadrupolmomenten zutage (siehe Tabelle III.8 mit den Quadrupolmomenten des oblaten Kerns in 2.Ordnung).



0
-5.0
-4.0
-3.0
-2.0
-1.0
-5.0
-6.0
-7.0
2.0
0
0.1
0.2
0.3
0.4

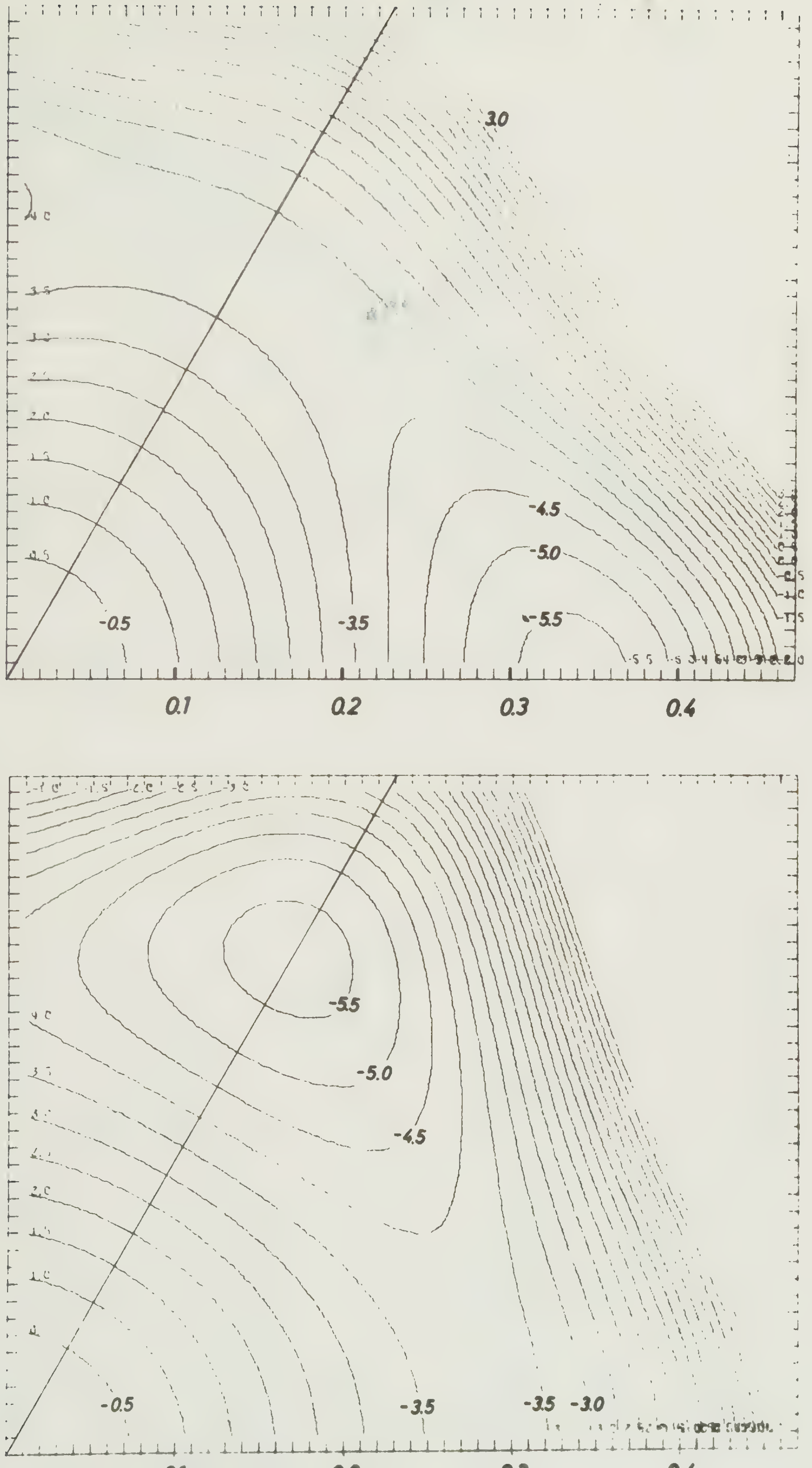


MeV
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
2+
0+
6+
4+
2+
0+
6+
4+
2+
0+
5+
4+
3+
2+
6+
5+
4+
6+
5+
4+
3+
2+
6+
4+
2+
0+
-5.73
B2 = 90

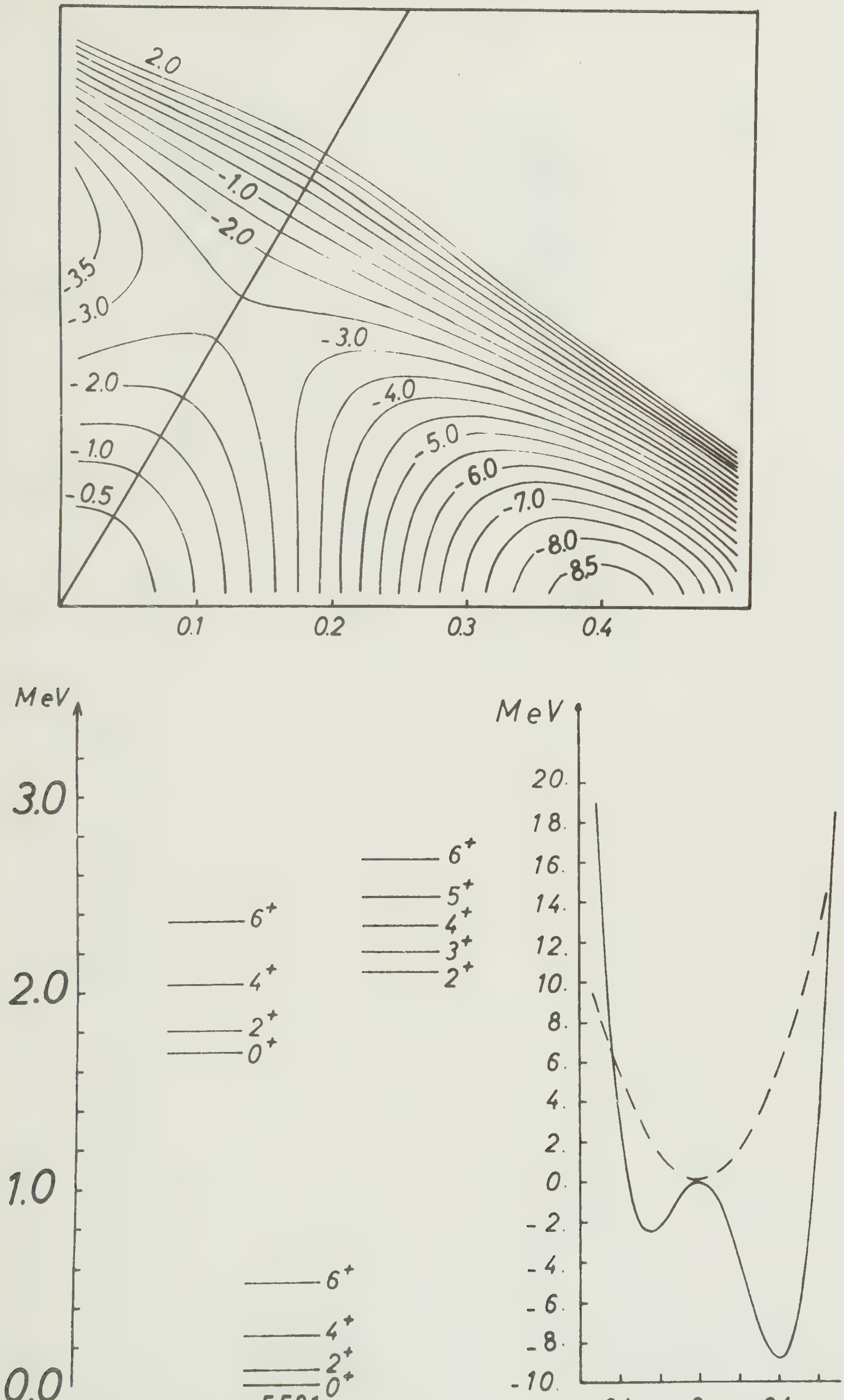


MeV
12.
10.
8.
6.
4.
2.
0.
- 2.
- 4.
- 6.
- 8.
-0.4
0
0.4

Figur III. 24

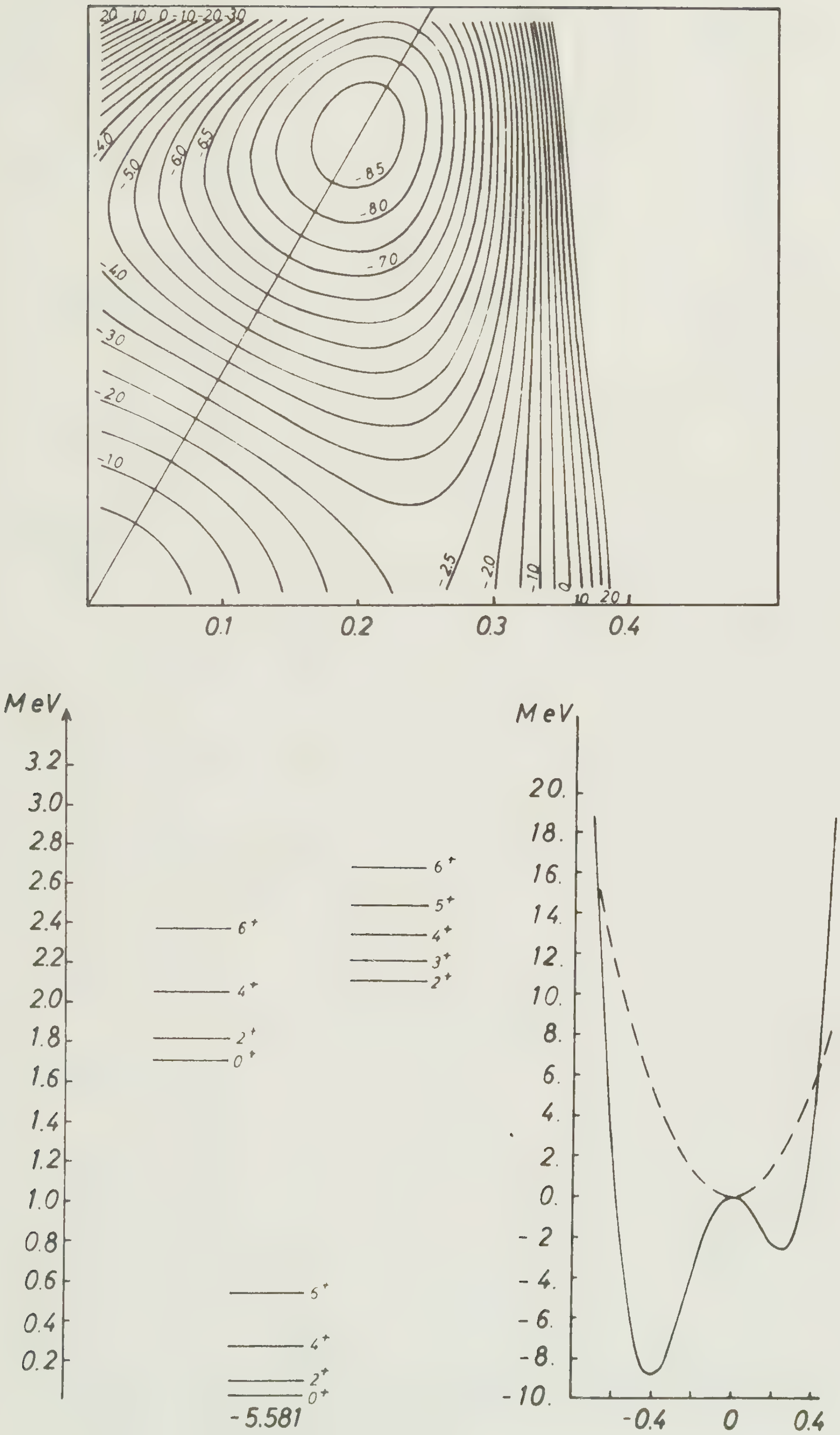


Figur III.25



$B_2 = 52$

Fig. III. 26



$B_2 = 52$

Figur III. 27

		Quadrupolmomente	Radien
Grundbande	0^+	0.	4.7738
	2^+	-2.142	4.7748
	4^+	-2.741	4.7768
β -Bande	0^+	0.	4.7636
	2^+	-1.969	4.7661
	4^+	-2.465	4.7695
γ -Bande	2^+	1.902	4.7600
	3^+	0.	4.7620
	4^+	-1.069	4.7643

B(E2)-Übergangswahrscheinlichkeiten:

$2^+(g) \rightarrow 0^+(g)$	1.117	$2^+(\beta) \rightarrow 0^+(g)$	0.020
$4^+(g) \rightarrow 2^+(g)$	1.621	$4^+(\beta) \rightarrow 2^+(g)$	0.020
$2^+(\beta) \rightarrow 0^+(\beta)$	0.973	$2^+(\gamma) \rightarrow 0^+(g)$	0.016
$4^+(\beta) \rightarrow 2^+(\beta)$	1.428	$4^+(\gamma) \rightarrow 2^+(g)$	0.010
$3^+(\gamma) \rightarrow 2^+(\gamma)$	1.040	$2^+(\gamma) \rightarrow 0^+(\beta)$	0.0002
$4^+(\gamma) \rightarrow 3^+(\gamma)$	0.734	$3^+(\gamma) \rightarrow 2^+(\beta)$	0.0046
$4^+(\gamma) \rightarrow 2^+(\gamma)$	0.554	$4^+(\gamma) \rightarrow 2^+(\beta)$	0.0134

Tabelle III.7

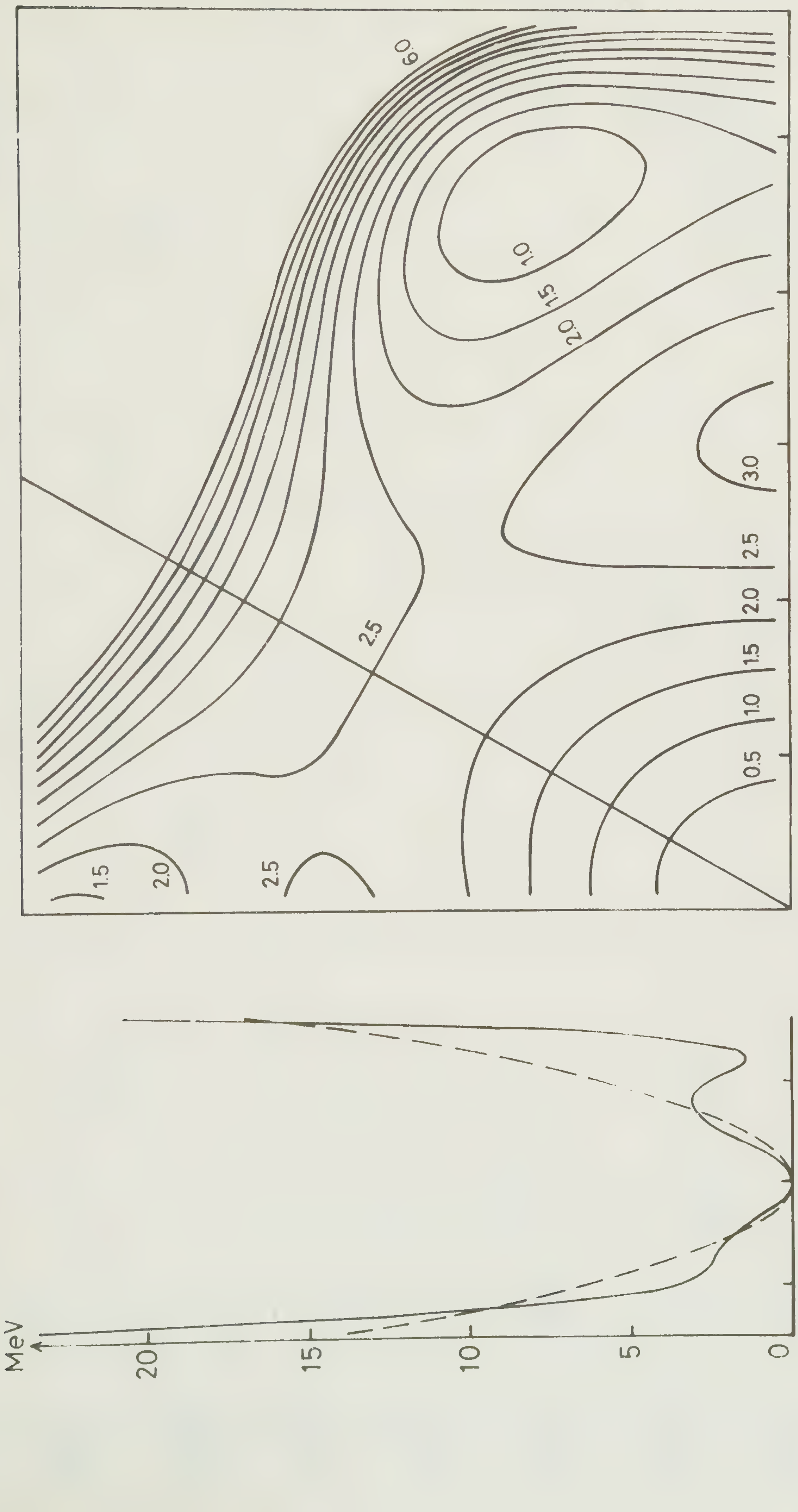
		Quadrupolmomente
Grundbande	0^+	0.
	2^+	1.462
	4^+	2.087
β -Bande	0^+	0.
	2^+	1.507
	4^+	1.836
γ -Bande	2^+	-1.506
	3^+	0.
	4^+	0.916

Tabelle III.8

J. Zwei Minima

Mit der kollektiven Potentialfläche der Figur III.28 betreten wir ein noch gänzlich unerforschtes Feld. Weder liegt ein sphärischer oder deformierter Kern vor noch ein Übergangskern zwischen beiden Typen. Vielmehr erkennen wir zwei Minima, das tiefer liegende im Ursprung, das etwas höher liegende im Asymmetrischen. Wir erwarten demgemäß, daß der Kern im Grundzustand sphärisch ist, daß aber bei höherer Energie Rotationsbanden einsetzen, oder umgekehrt, daß bei deformiertem Grundzustand angeregte Niveaus sphärischen Charakter existieren. Tatsächlich lassen sich beide Möglichkeiten durch Abänderung des B_2-Wertes verwirklichen (Figur III.29).

In den Figuren III.30 und III.31 sind für zwei weitere B_2-Werte außer den Energie-Spektren auch andere dynamische Größen notiert. Es liegt nach wie vor die kollektive Potentialfläche der Figur III.28 zugrunde. Wir diskutieren nur kurz die Figur III.31. Der 0^+-Grundzustand liegt im Ursprungsminimum. Bevor aber der sphärische 2^+-Zustand und das $0^+,2^+,4^+$-Triplett erscheinen, setzen schon die Rotationsbanden ein, die zum 2.Minimum gehören. Man identifiziert die Zugehörigkeit der einzelnen Zustände zu den beiden Töpfen mittels der Quadrupolmomente oder besser noch mittels der Radien, weil ja die Quadrupolmomente zur Unterscheidung der 0^+-Zustände untauglich sind. Die deutlich kleineren Quadrupolmomente und Radien der ganz links gezeichneten Niveaus $0^+,2^+$ usw. beseitigen alle Zweifel an der genannten Zuordnung der Zustände zu den beiden Minima. Außerdem, das wird hier nicht vorgeführt, sind die Wellenfunktionen beider Typen von Niveaus auffällig verschieden. Der 0^+-Grundzustand z.B. enthält zu über 90% den untersten Oszillator-Zustand der verwendeten Basis als Komponente, und er gibt damit zu erkennen, daß er selber mit ziemlicher Reinheit ein Oszillator-Zustand ist. Aus den Übergangswahrscheinlichkeiten ersieht man, daß Zustände innerhalb des gleichen Topfes leicht ineinander übergehen können; dagegen erweist sich die Barriere zwischen beiden Minima als beinahe undurchdringlich, die Übergangswahrscheinlichkeiten verschwinden praktisch. Dies ist im Einklang mit dem eindrucksvollen Befund, daß die Multiplett-Struktur nicht vom deformierten Minimum und umgekehrt die Banden-Struktur nicht vom sphärischen Minimum zerstört ist. Ein Kern im 0^+-Zustand des 2.Minimums kann überhaupt nicht in den Grundzustand fallen, bildet also ein Isomer.

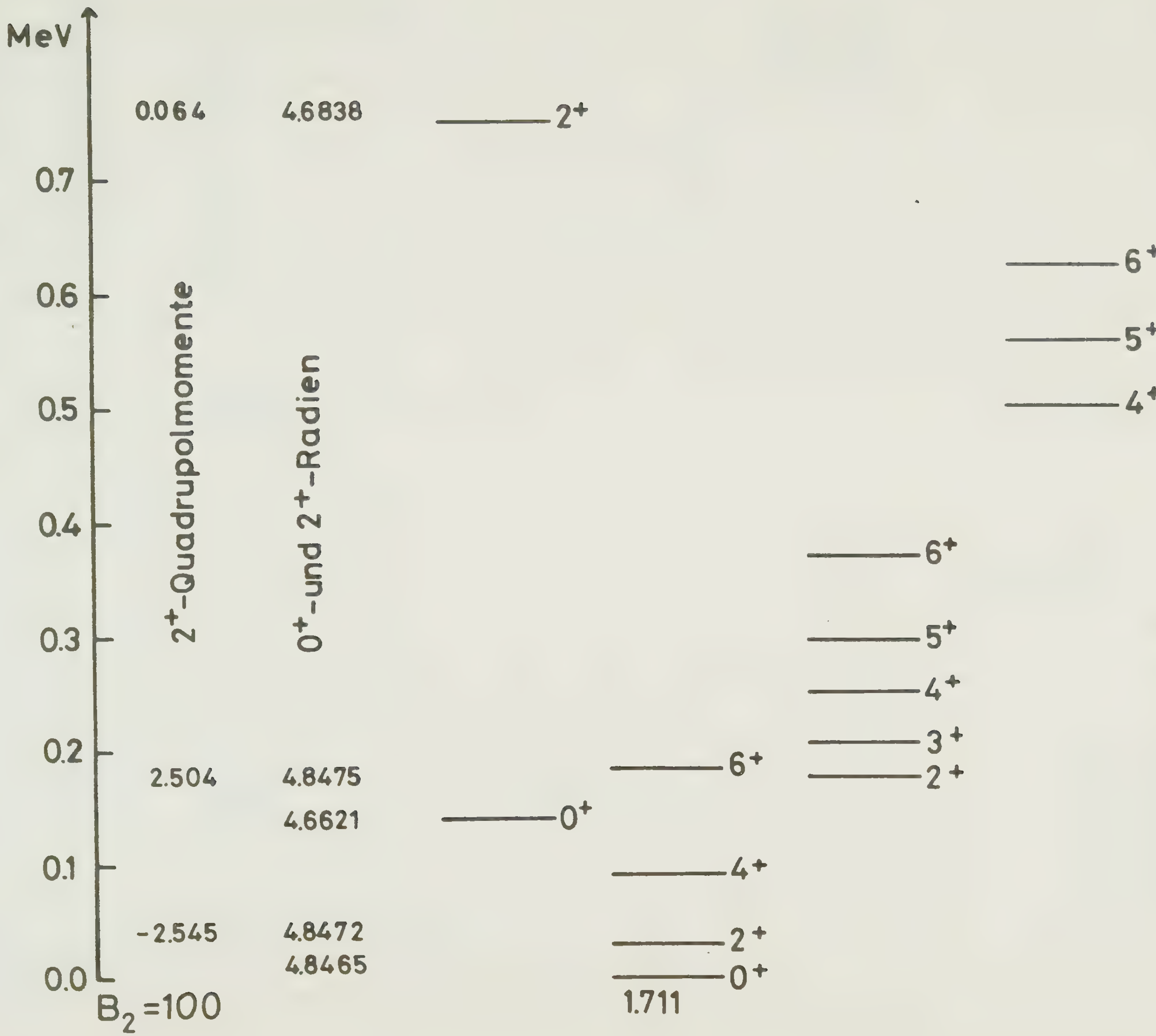


MeV
20
15
10
5
0
-0.4
0
0.4
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.5
1.0
1.5
2.0
2.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
6.0

Figur III. 28



Figur III. 29



$B(E2/0^+_{(1)} \rightarrow 2^+_{(1)}) = 8.429$

$B(E2/0^+_{(1)} \rightarrow 2^+_{(2)}) = 0.205$

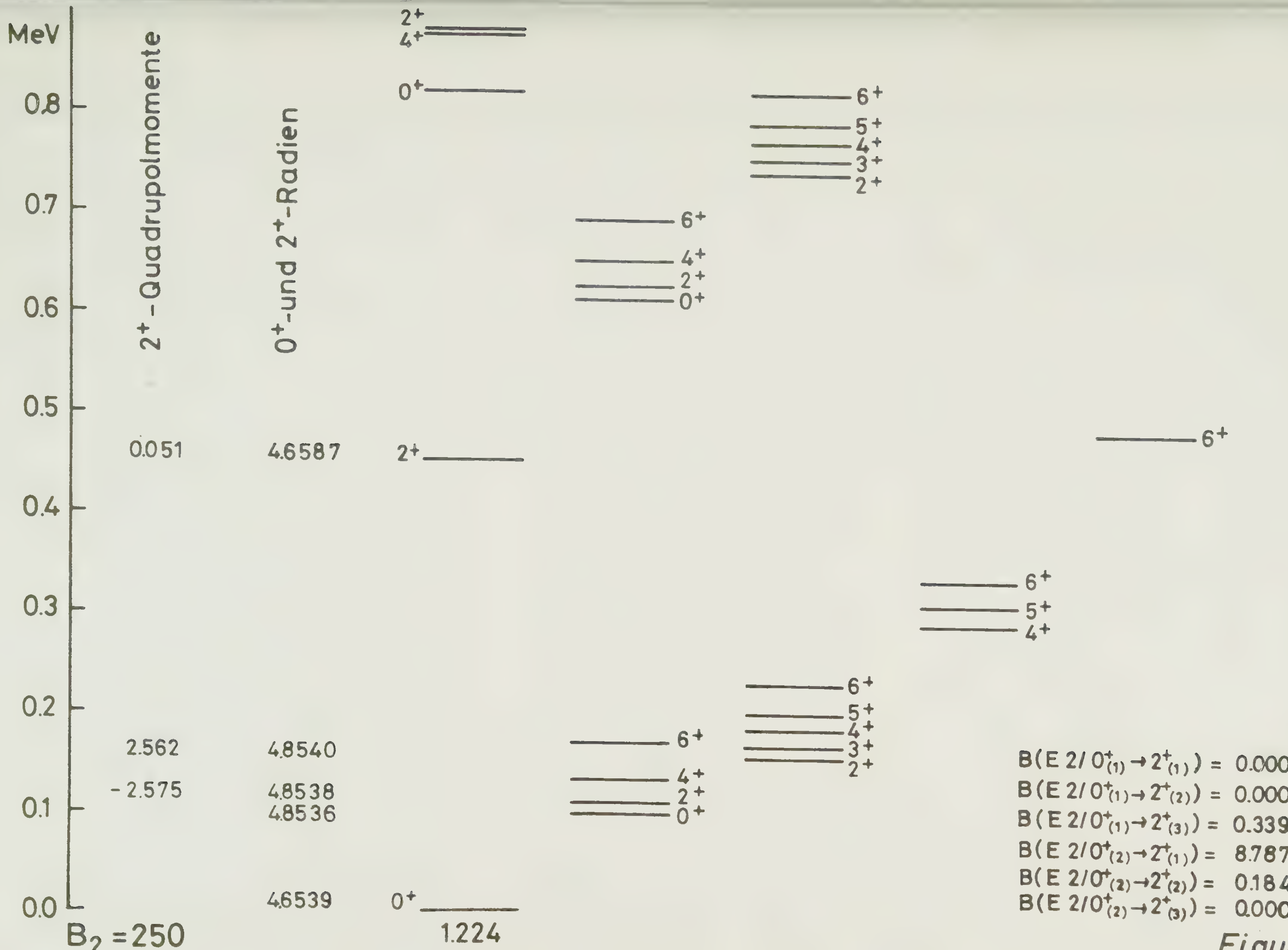
$B(E2/0^+_{(1)} \rightarrow 2^+_{(3)}) = 0.004$

$B(E2/0^+_{(2)} \rightarrow 2^+_{(1)}) = 0.008$

$B(E2/0^+_{(2)} \rightarrow 2^+_{(2)}) = 0.000$

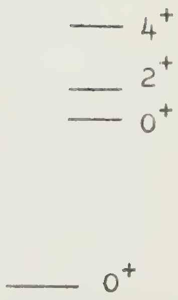
$B(E2/0^+_{(2)} \rightarrow 2^+_{(3)}) = 0.578$

Figur III. 30


MeV
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.0
$B_2 = 250$
2^+-Quadrupolmomente
0.051
2.562
- 2.575
0^+-und 2^+-Radien
4.6587
4.8540
4.8538
4.8536
4.6539
2^+
4^+
0^+
2^+
0^+
1.224
6^+
4^+
2^+
0^+
6^+
4^+
2^+
0^+
6^+
5^+
4^+
3^+
2^+
6^+
5^+
4^+
3^+
2^+
6^+
5^+
4^+
6^+
$B(E2/0^+_{(1)} \to 2^+_{(1)}) = 0.000$
$B(E2/0^+_{(1)} \to 2^+_{(2)}) = 0.000$
$B(E2/0^+_{(1)} \to 2^+_{(3)}) = 0.339$
$B(E2/0^+_{(2)} \to 2^+_{(1)}) = 8.787$
$B(E2/0^+_{(2)} \to 2^+_{(2)}) = 0.184$
$B(E2/0^+_{(2)} \to 2^+_{(3)}) = 0.000$

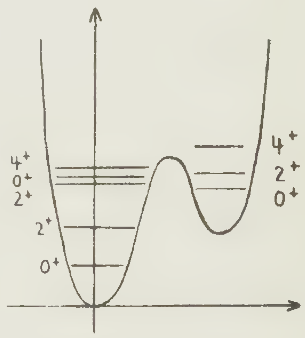
Figur III.31

Es gibt mehrere Kerne, z.B. Ge^{72}, Ca^{40} oder Zr^{90}, bei denen auf den 0^+-Grundzustand als erstes angeregtes Niveau wieder ein 0^+-Zustand folgt. Im Falle Ca^{40} und Zr^{90} sehen die Spektren wie in Figur III.32 aus. Figur III.31 zeigt genau auch einen solchen Fall und gibt uns damit einen Hinweis, in welcher Richtung wir zu suchen haben, wenn wir diese merkwürdigen Spektren verstehen wollen. Vermutlich liegen in den erwähnten Fällen Kerne vor, deren kollektive Potentialflächen mehrere Minima besitzen. Entscheidend für die Bestätigung solcher Vorhersagen ist allerdings (abgesehen von den Energien) insbesondere auch die Übereinstimmung der berechneten und experimentellen Übergangswahrscheinlichkeiten.



Figur III.32

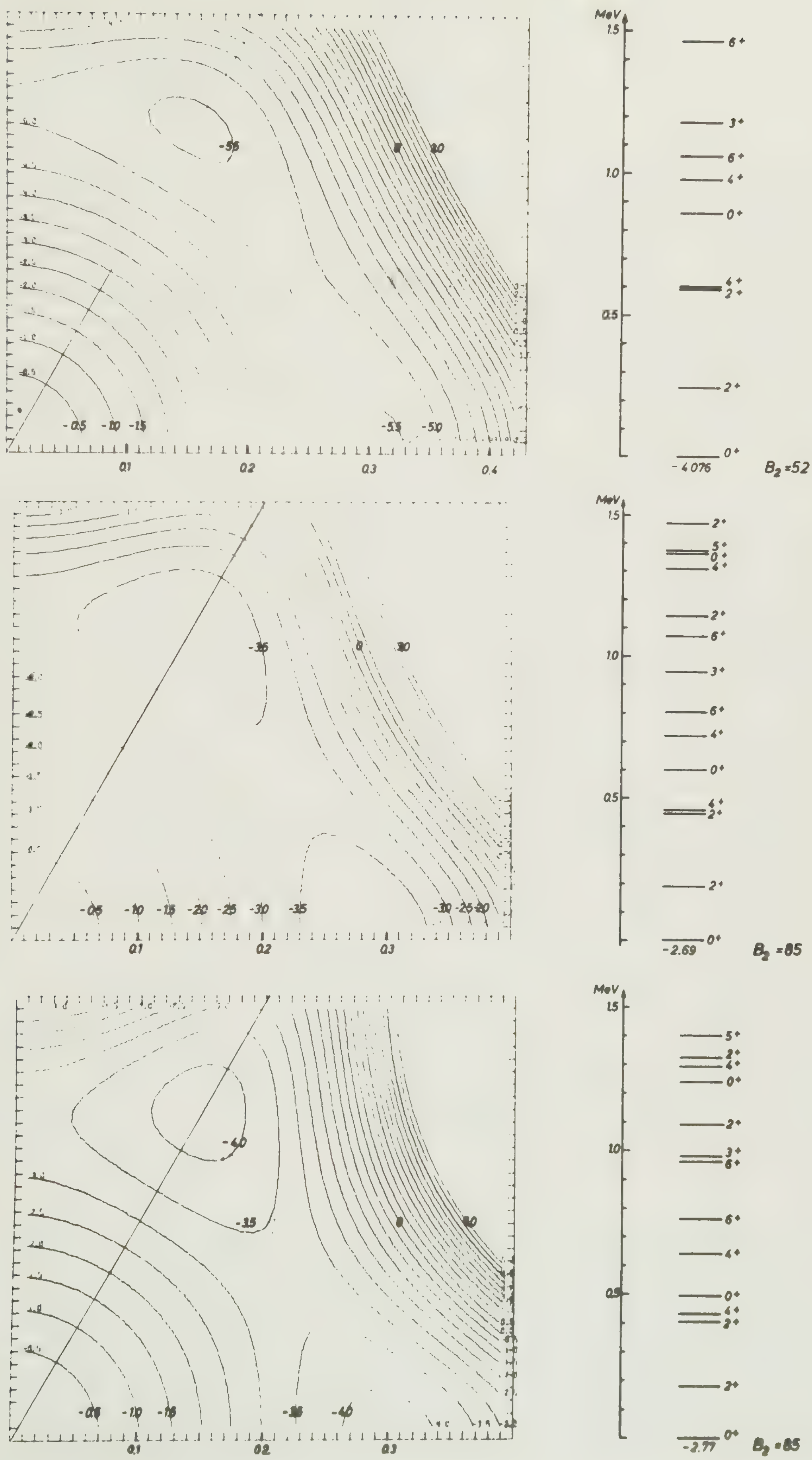
Bei Cd^{112} und Cd^{114} erscheinen dort, wo man das Oszillator-Triplett erwartet, ein weiterer 0^+- und ein weiterer 2^+-Zustand und dicht darüber auch noch ein zweiter 4^+-Zustand. Wieder bietet sich zur Erklärung eine kollektive Potentialfläche mit zwei Minima an (Figur III.33): links sind sphärische Niveaus und rechts setzt eine Rotationsbande zufällig auf der Höhe des Tripletts ein. Bei der Studie in Figur III.31 beginnen die Rotationsbanden sofort über dem sphärischen Grundzustand. Um Cd wiederzugeben, werden wir also höher liegende zweite Minima konstruieren müssen.



Figur III.33

Zwei Minima finden wir auch in den drei kollektiven Potentialflächen der Figur III.34; diesmal aber liegen beide im achsialsymmetrisch deformierten Bereich. Das prolate und oblate Minimum haben gleiche Tiefe, und beide Minima sind nur durch eine ziemlich niedrige Barriere voneinander getrennt. Bei den Spektren fallen einige Gemeinsamkeiten mit Fig.III.23 auf: Wieder sind die Abstände der untersten Niveaus fast harmonisch; stets hat der zweite angeregte Zustand den Drehimpuls 2; oben und in der Mitte ist das "Triplett" unvollständig. Die ersten angeregten Niveaus der unteren Abbildung würde man ohne Kenntnis der Fläche sofort (aber fälschlicherweise) als den 1-Phononen-Zustand und das 2-Phononen-Triplett ansprechen.

Noch nicht gerechnet sind Fälle, bei denen das prolate und oblate Minimum verschiedene Tiefe haben oder bei denen die Barriere zwischen beiden Minima wesentlich erhöht ist. Solche Flächen werden zweifellos weitere interessante Typen von Spektren hervorbringen. Wir sind nicht damit einverstanden, daß man alle Niveaus, die nicht in das bisherige Schema (sphärische Multipletts und Rotationsbanden) passen, für Einteilchen-Anregungen erklärt; vielmehr ist nach unserer Ansicht das Kollektivmodell noch in keiner Weise ausgeschöpft. Wir werden vor allem nachprüfen, ob nicht zahlreiche der sogenannten "sphärischen" Kerne in Wirklichkeit 2 Minima besitzen oder Flächen von der Art der Fig.III.23 haben.


MeV
1.5
1.0
0.5
6+
3+
6+
4+
0+
4+
2+
2+
0+
-4.076
B2=52
-5.5
-0.5
-1.0
-1.5
-5.5
-5.0
0.1
0.2
0.3
0.4
2+
5+
0+
4+
2+
6+
3+
6+
4+
0+
4+
2+
2+
0+
-2.69
B2 =85
-3.5
-0.5
-1.0
-1.5
-2.0
-2.5
-3.0
-3.5
-3.0
-2.5
-2.0
5+
2+
4+
0+
2+
3+
6+
6+
4+
0+
4+
2+
2+
0+
-2.77
B2 =85
-4.0
-3.5
-0.5
-1.0
-1.5
-3.5
-4.0

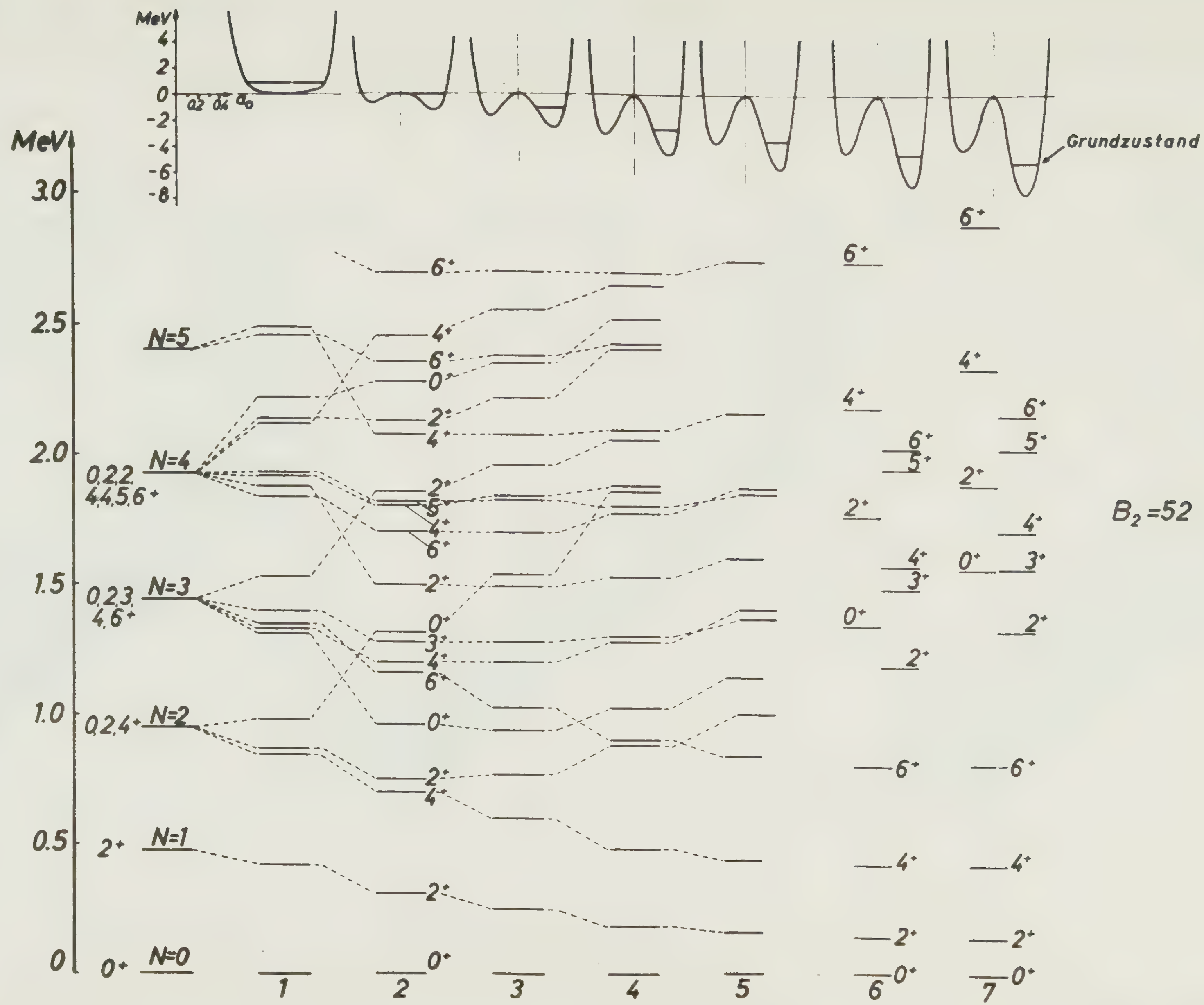
Figur III.34

K. Übergang "sphärisch - deformiert" [33]

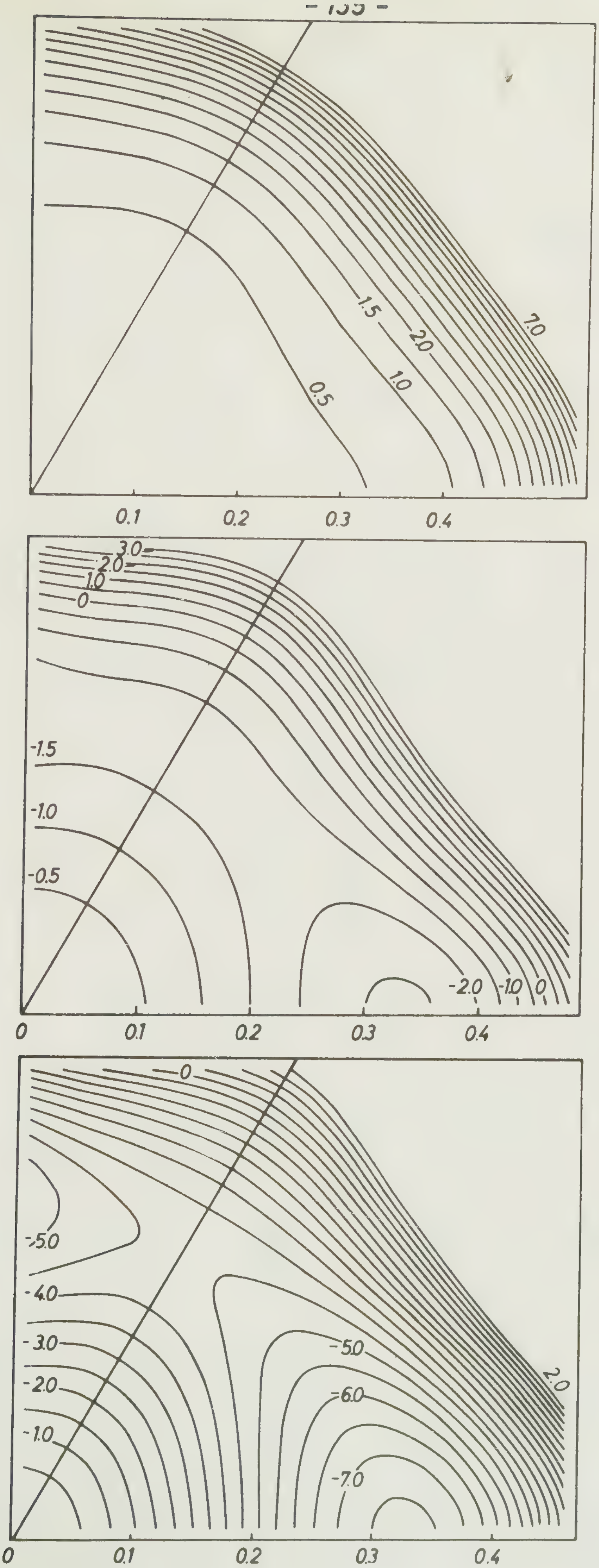
Sheline [34] und Sakai [35] haben jedem Oszillator-Zustand einen Rotator-Zustand zugeordnet und umgekehrt. Sie leiteten diese Zusammenhänge her a) aus der Systematik der experimentellen Rotations- und Vibrations-Niveaus und b) aus dem einfachen Vergleich der Niveau-Spins im Oszillator- und Rotator-Modell. Um die theoretische Grundlage ihrer Zuordnungs-Argumente zu überprüfen, untersuchten wir mehrere Typen von Übergängen vom Sphärischen zum Deformierten.

In Figur III.35 konstruierten wir eine Folge von kollektiven Potentialflächen, deren prolates Minimum schrittweise tiefer gemacht wurde. Da die prolate-oblate-Differenz, d.h. die Steilheit der Minima in γ-Richtung, für diesen speziellen Übergang ziemlich klein ist, kommt man bei Rotationsspektren an, bei denen der γ-Bandenkopf tiefer als der β-Bandenkopf liegt. Hätten wir die Zustände benachbarter Spektren rein gemäß der Energie verbunden, dann wären die Kreuzungen von Niveaus gleichen Spins nicht vorgekommen. Bekanntlich können sich zwei wechselwirkende Levels, und das sind hier gerade die mit gleichem Drehimpuls, vom energetischen Standpunkt zwar nicht kreuzen, aber im allgemeinen mischen sie ihre anderen physikalischen Eigenschaften oder tauschen diese sogar aus, wenn sie sich einander nähern. Deshalb haben wir eine Niveau-Zuordnung gemäß der Quadrupolmomente (Tabelle III.9) und Übergangswahrscheinlichkeiten bevorzugt, die uns physikalisch sinnvoller erschien. Drei vollständige kollektive Potentialflächen dieses Übergangs zeigt Figur III.36. Sie gehören zum ersten, dritten und letzten Spektrum. Oben ein fast sphärischer Vibrator, in der Mitte ein Übergangskern und unten ein stark deformierter Rotator.

Um die Niveau-Zuordnung bei diesem speziellen Übergangstyp, der, wie gesagt, durch geringe γ-Abhängigkeiten der kollektiven Potential-Fläche charakterisiert ist, noch zuverlässiger treffen zu können, untersuchten wir in Figur III.37 den Übergang vom sphärischen zum deformierten Gebiet mit γ-unabhängigen Potentialen (eine Fläche dieses Typs in Figur III.38). Auf Grund der Matrixelemente und Auswahlregeln der γ-unabhängigen Terme (Abschnitt III.C.) spalten Oszillator-



Figur III.35


1.5
2.0
1.0
0.5
7.0
0.1
0.2
0.3
0.4
3.0
2.0
1.0
0
-1.5
-1.0
-0.5
-2.0
-1.0
0
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0
-5.0
-4.0
-3.0
-2.0
-1.0
-5.0
-6.0
-7.0
2.0
0
0.1
0.2
0.3
0.4

Figur III.36

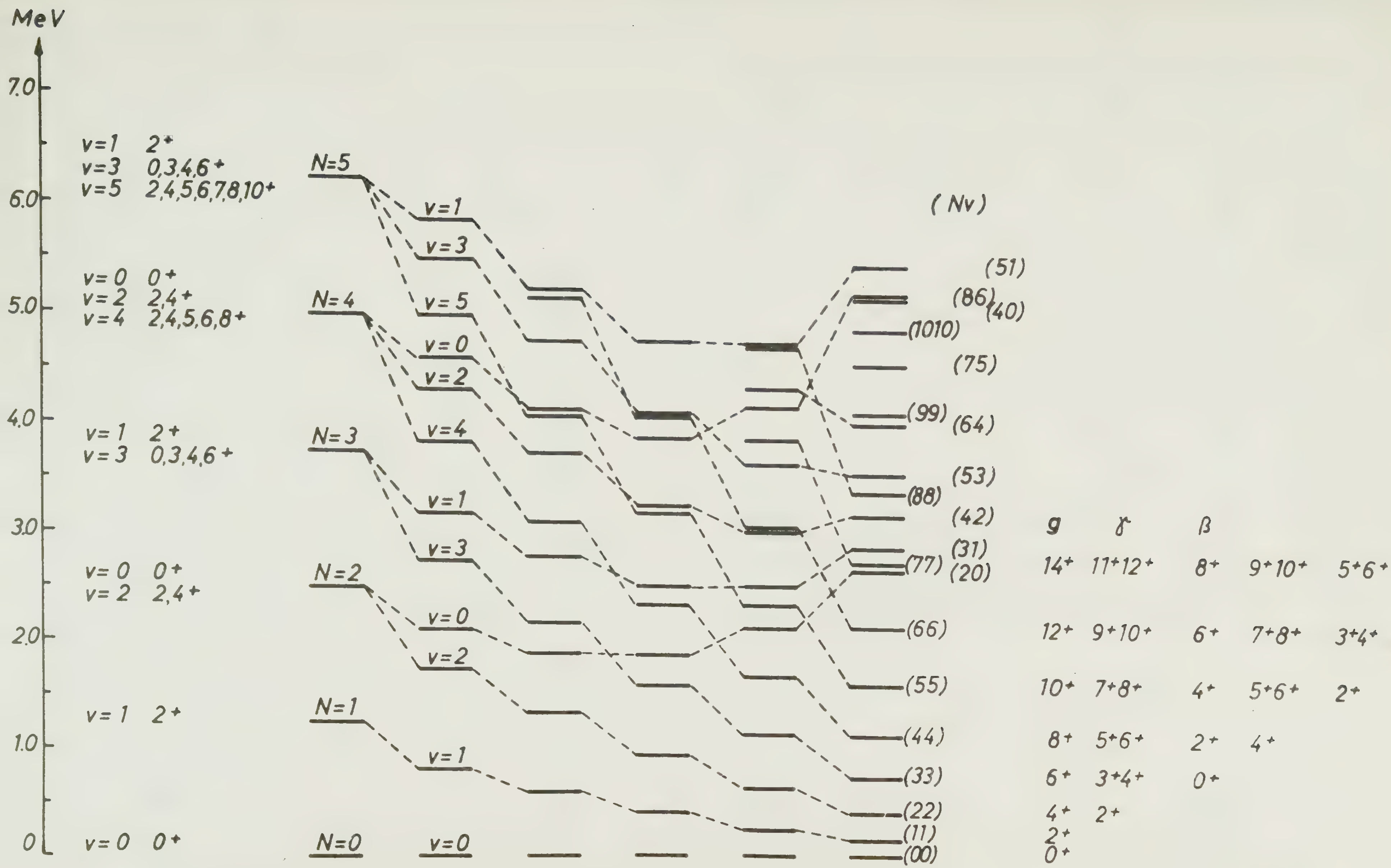
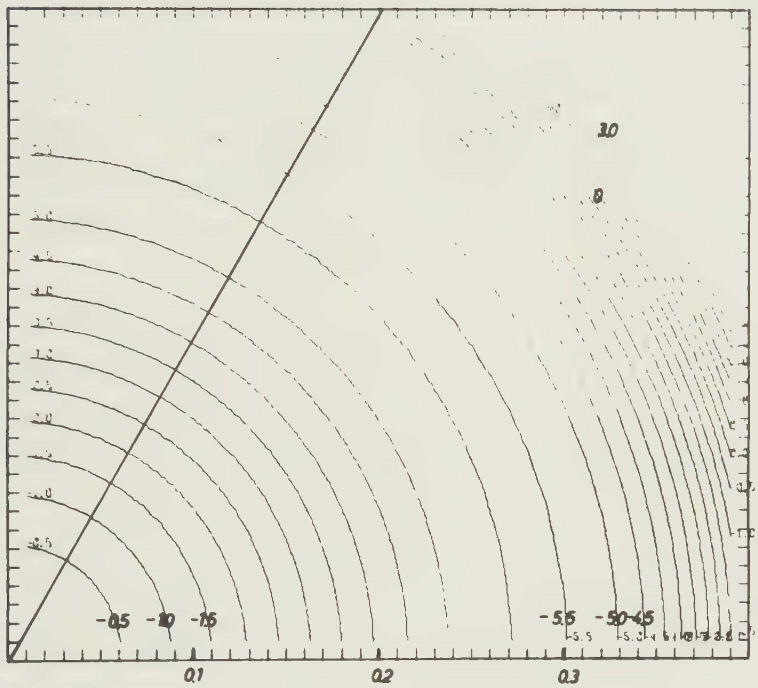
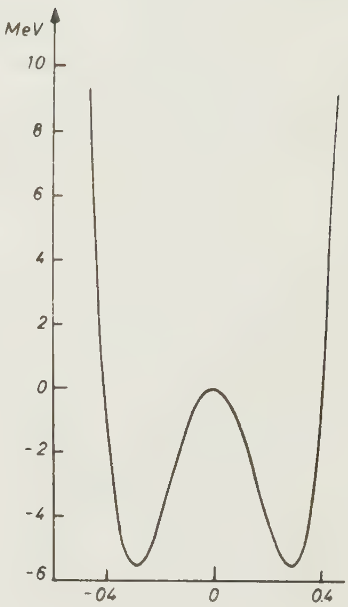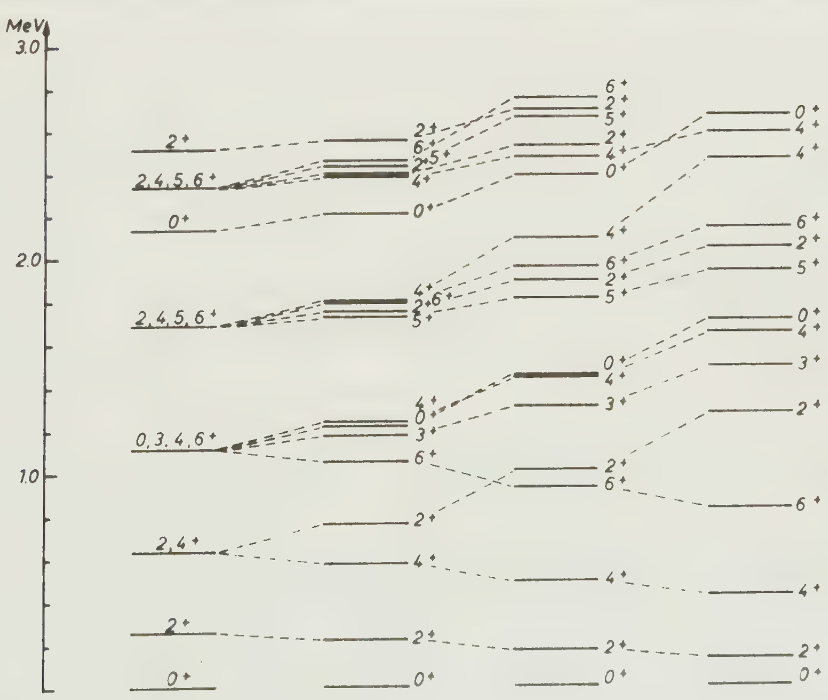


Figure III.37

Figur III.38







Figur III. 39

Niveaus mit gleichem N und v nicht auf, und v bleibt darüber hinaus eine gute Quantenzahl, d.h. Oszillator-Zustände mit verschiedener Seniorität wechselwirken nicht miteinander. Deshalb sind Kreuzungen von Niveaus gleichen Drehimpulses hier auch nach der Energiemethode möglich und die Zuordnungen in Figur III.37 eindeutig. Wenn anschließend γ-Abhängigkeiten der kollektiven Potential-Fläche erzeugt werden (Figur III.39), heben sich die Entartungen auf und genau die Zustände, die in Spalten auf der rechten Seite angeordnet sind, werden die Mitglieder der verschiedenen Rotationsbanden. Für einen solchen Weg durch den Übergangsbereich kann man also mit Bestimmtheit die Oszillator-Zustände ausmachen, aus denen die Rotationsniveaus entspringen.

In Figur III.40 geht es wieder um den Zusammenhang der Niveaus in sphärischen und deformierten Kernen. Aber diesmal wählten wir einen Übergangsbereich, der zu Rotationsspektren mit der γ-Bande über der β-Bande führt, und der realisiert wird durch prolate Minima mit steilem Anstieg in γ-Richtung. Besonders klar wird dieser Übergangstyp durch die drei vollständigen kollektiven Potentialflächen der Fig.III.41 für das erste, zweite und letzte Spektrum illustriert. Die Änderung der Quadrupolmomente läßt sich an Hand der Tabelle III.10 verfolgen. Man bekommt jetzt, verglichen mit vorhin, eine andere Zuordnung von Vibrations- und Rotations-Niveaus.

Um den Kreis zu schließen, haben wir in Figur III.42 die beiden möglichen Rotationsspektren $E_\gamma < E_\beta$ und $E_\gamma > E_\beta$ schrittweise durch Vergrößerung der prolate-oblate-Differenz ineinander überführt. Wie die Übergangswahrscheinlichkeiten oder Quadrupolmomente (Tabelle III.11) beweisen, werden bei diesem Übergang die gleichnamigen Zustände an einer Stelle so stark gemischt, daß dort ihre Zuordnungen zur γ- oder zur β-Bande willkürlich ist.

Die wichtigsten Schlüsse, die wir aus diesen Studien gezogen haben, seien kurz zusammengefaßt.

1) Obwohl sich alle dynamischen Größen beim Übergang vom sphärischen zum deformierten Gebiet kontinuierlich ändern, d.h. obwohl die sphärischen Niveaus zweifellos stetig in die deformierten Niveaus übergehen, besitzen doch die Oszillator-Zustände einerseits und Rotator-Zustände andrerseits in dynamischer Hinsicht keine Ähnlichkeit mehr. Daher ist eine gegenseitige Zuordnung der Niveaus beider Grenzfälle physikalisch ohne Belang.

2) Für das Verständnis der Übergangskerne dagegen sind solche Studien durchaus nützlich, erleichtern sie uns doch die Identifizierung und Klassifizierung der Niveaus als Quasi-Multipletts oder Quasi-Banden.

3) Eine eindeutige Zuweisung der Oszillator-Zustände zu den Mitgliedern der Rotationsbanden ist sogar unmöglich in dem Sinne, daß diese abhängt vom Weg, den man durch den Übergangsbereich wählt und von den Kriterien, nach denen man die Niveaus benachbarter Spektren verbindet. Wir verzichten deshalb darauf, Zuordnungstabellen anzugeben wie Sheline und Sakai.

	1	2	3	4	5	6	7	
$2^+(1)$	-0.28	-0.79	-1.20	-1.52	-1.62	-1.67	-1.68	g
$2^+(2)$	0.08	0.54	0.91	1.23	1.33	1.42	1.49	γ
$2^+(3)$	-0.54	-0.85	-0.93	-0.94	-1.00	-1.15	-1.31	β
$4^+(1)$	-0.58	-1.20	-1.63	-1.95	-2.06	-2.13	-2.13	g
$4^+(2)$	-0.17	0.15	0.34	0.21	0.04	-0.25	-0.49	γ
$4^+(3)$	0.24	0.45	0.58	0.79	0.77	-0.12	-1.47	β
$4^+(4)$	-0.96	-1.38	-1.54	-1.44	-1.25	-0.12	1.50	

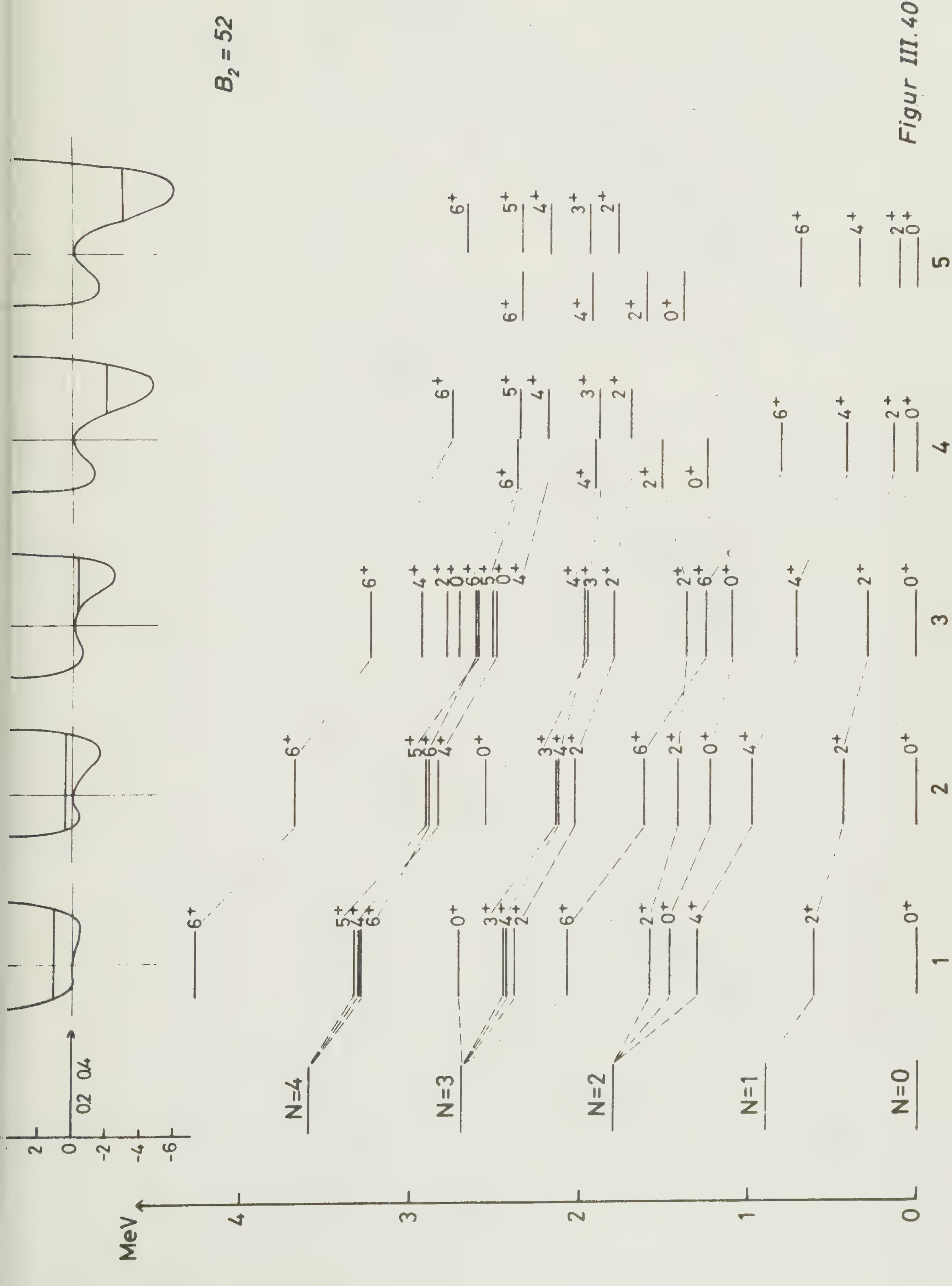
Tabelle III.9

	1	2	3	4	5	
$2^+(1)$	-0.78	-1.04	-1.29	-1.69	-1.83	g
$2^+(2)$	0.44	0.57	0.60	-0.27	-1.14	β
$2^+(3)$	-0.64	-0.71	-0.70	0.21	1.08	γ
$4^+(1)$	-1.18	-1.47	-1.74	-2.19	-2.36	g
$4^+(2)$	-0.19	-0.30	-0.49	-1.16	-1.59	β
$4^+(3)$	-1.15	-1.33	-1.47	-1.48	-1.33	γ
$4^+(4)$	0.62	0.80	0.98	1.14	0.96	

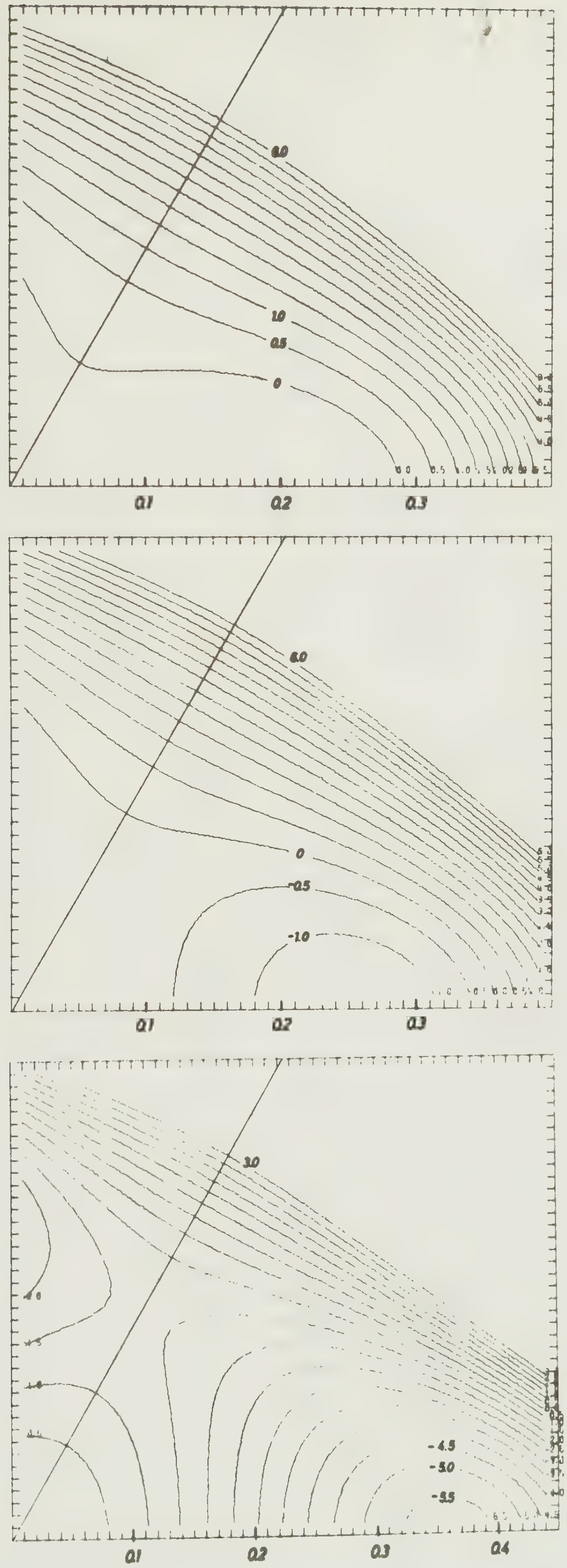
Tabelle III.10

		1	2	3	4	5	
$2^+(1)$	g	-1.74	-1.82	-1.89	-1.97	-2.05	g
$2^+(2)$	γ	1.49	1.56	1.58	0.40	-1.83	β
$2^+(3)$	β	-1.36	-1.54	-1.60	-0.45	1.76	γ
$4^+(1)$	g	-2.21	-2.32	-2.42	-2.52	-2.62	g
$4^+(2)$	γ	-0.47	-0.67	-0.84	-1.29	-2.18	β
$4^+(3)$	β	-1.81	-2.11	-2.19	-1.94	-1.22	γ
$4^+(4)$		1.62	1.95	2.03	1.87	0.24	

Tabelle III.11



Figur III.40



Figur III. 41

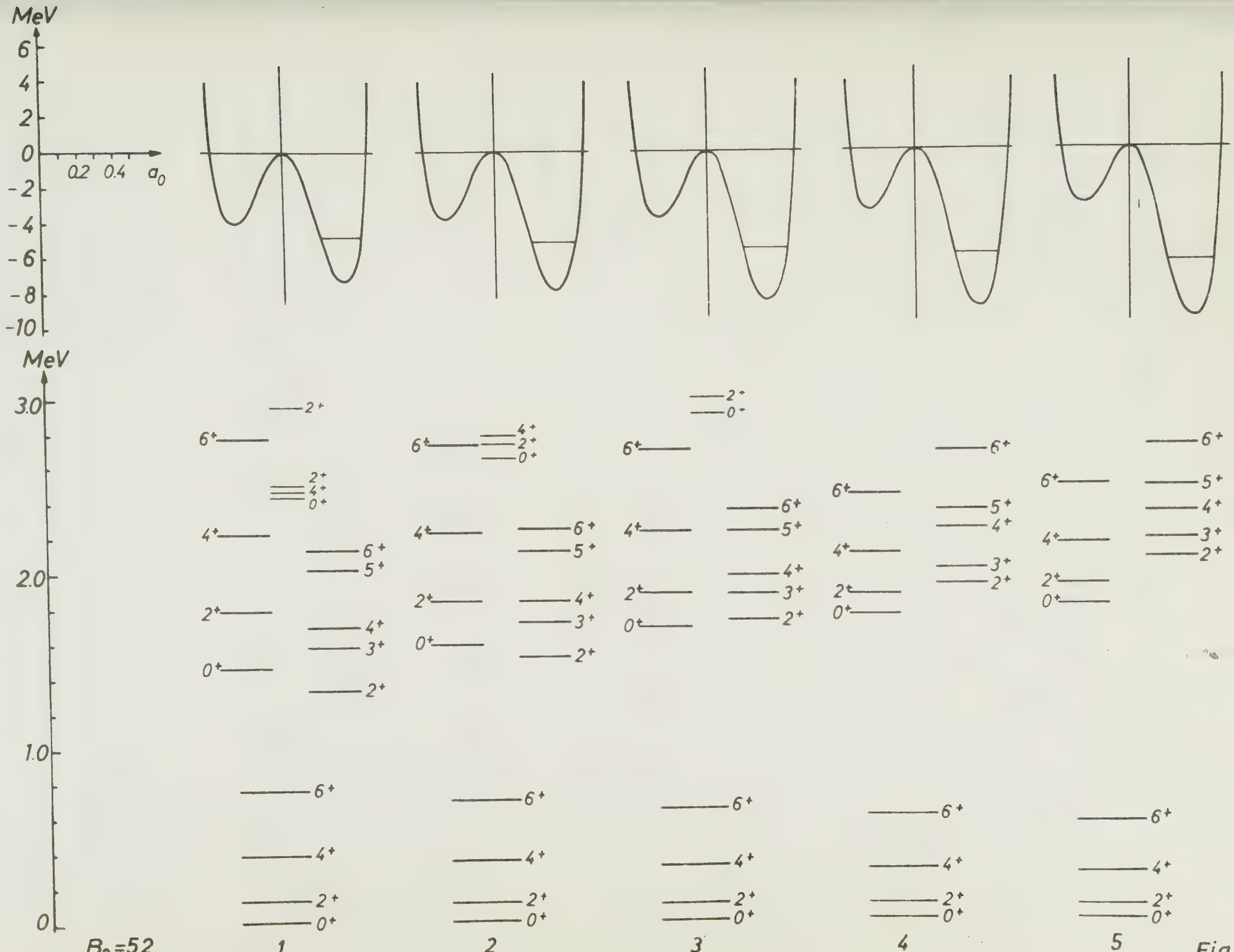


Fig. III.4

L. Even-Odd-Staggering in γ-Banden [36]

1963 fielen Emery et. al. [37] Unregelmäßigkeiten in der γ-Bande von Os^{186} auf. Neulich beobachtete Rakovitskii [38] auch in zahlreichen anderen Kernen (z.B. den Er- und Dy-Isotopen) Abweichungen der geraden γ-Banden-Mitglieder vom I(I+1)-Gesetz. Gilt diese Regel, dann ist der Trägheitsparameter $A_I = (E_I - E_{I-1})/2I$ der γ-Bande konstant. Trägt man aber die experimentellen A_I gegen I auf, so findet man eine Zickzack-linie, welche deutlich macht, daß die ungeraden Zustände der γ-Bande energetisch zu hoch (oder die geraden zu niedrig) liegen gemessen am I(I+1)-Gesetz. Diesen Effekt nennen wir "even-odd-staggering". Andrerseits liefert die grafische Darstellung von $A_I' = (E_I - E_{I-2})/(4I-2)$ gegen I eine gerade Linie und zeigt damit an, daß sowohl die geraden Zustände als auch die ungeraden Zustände unter sich die I(I+1)-Niveau-Abstände in hohem Maße einhalten. Die vermutete Ursache: Wegen des Fehlens ungerader Zustände in der γ-Bande führt die Wechselwirkung zwischen der γ-Bande und der β-Bande nur zu einer Abstoßung der Niveaus mit geradem Spin, während die ungeraden Niveaus der γ-Bande unbeeinflußt liegen bleiben.

Das Problem wurde bereits früher von Lindner [39] theoretisch angegangen. Im Rahmen des Rot-Vib-Modells [27] und des Davydow-Modells [25] untersuchte er die Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Rotationsbanden. Da wir die Näherungen, zu denen Lindner gezwungen war, mit unserem Modell umgehen und da wir auch die Auswirkungen des anharmonischen kinetischen Terms prüfen wollen, wenden wir uns dem Effekt erneut zu. Die 3 Figuren, an denen wir die gerade-ungerade-Schwankungen demonstrieren möchten, sind bereits früher in anderen Zusammenhängen gezeigt worden.

In Figur III.42 wird durch allmähliches Vergrößern der prolate-oblate-Differenz die relative Lage der Banden zueinander umgekehrt. Liegt die γ-Bande tiefer als die β-Bande, dann sind die geraden γ-Banden-Mitglieder abgesenkt; befindet sich aber die γ-Bande über der β-Bande, so tritt auch der gegenteilige even-odd-Effekt auf. Dies ist die erste wichtige Stütze für die oben erwähnte Deutung. Man störe sich nicht an

den großen Tiefen der Minima in Figur III.42, bei denen sich doch die saubere I(I+1)-Bandenstruktur längst eingestellt haben sollte. Wie in Abschnitt III.H. diskutiert, entscheidet auch der Parameter B_2 mit über die Tiefe des Grundzustandes, die Starrheit des Rotators und das Ausmaß der Wechselwirkungen. Für flache Minima und dafür größere B_2 - Werte würden wir ähnliche Verhältnisse wie in Figur III.42 finden.

Die Auswirkung der kinetischen Anharmonizität auf das even-odd-staggering ist in Figur III.11 dargestellt. Zugleich wird dort mittels der Übergangswahrscheinlichkeiten die Rolle der Wechselwirkung zwischen der β-Bande und γ-Bande quantitativ aufgezeigt. Besonders B(E2)-Paare wie

$$0^+(\beta) \longrightarrow 2^+(\beta), 2^+(\gamma)$$
$$2^+(\gamma), 2^+(\beta) \longrightarrow 3^+(\gamma)$$
$$3^+(\gamma) \longrightarrow 4^+(\gamma), 4^+(\beta)$$

(die für einen starren Rotator verschwinden) offenbaren die Ähnlichkeit der geraden Zustände beider Banden und damit den Grad der Wechselwirkung zwischen ihnen. Diese Studie beweist, daß tatsächlich eine starke Wechselwirkung zwischen den Banden zum Auftreten der gerade-ungerade-Schwankung führt: je größer die B(E2)-Werte zwischen den Banden, um so auffälliger die Abweichungen vom I(I+1)-Gesetz. Sind die β- und γ-Bande weit genug voneinader getrennt, dann hört die Wechselwirkung auf und die Energie-Intervalle gehorchen wieder der I(I+1)-Regel.

Deutlicher noch als bei den Energien ist das even-odd-staggering in den mittleren quadratischen Radien sichtbar. Tabelle III.12 zeigt für drei Spektren der Figur III.11, daß große (kleine) Energie-Intervalle begleitet sind von großen (kleinen) Zunahmen der Radien.

Im Falle $E_\gamma < E_\beta$ haben die kollektiven Potential-Flächen verhältnismäßig geringe Abhängigkeiten von γ, und man kann sich daher den even-odd-Effekt der γ-Bande auch noch auf andere Weise verständlich machen. Bekanntlich spalten Oszillator-Niveaus mit gleicher Phononenzahl N und gleicher Seniorität v für beliebige γ-unabhängige Potentiale nicht auf. Aus der Studie der Figur III.37 geht hervor, daß genau die Niveau-Paare $(3^+,4^+)$, $(5^+,6^+)$, $(7^+,8^+)$ usw. der γ-Bande von Oszillator-Zuständen mit gleichem N und v abstammen und somit für γ-unabhängige

Potentiale entartet sind. Daraus folgt sofort, daß even-odd-staggering immer dann auftritt, wenn die γ-Abhängigkeit der kollektiven Potentialfläche, d.h. die prolate-oblate-Differenz, nicht genügend ausgeprägt ist.

Der even-odd-Effekt in der ersten γ-Bande asymmetrischer Kreisel wird in Figur III.13 vorgeführt (besonders deutlich bei $P_3=-2$). Das Neuartige: Nicht die Wechselwirkung mit der β-Bande sondern die mit der Grundbande ist verantwortlich für die Verletzung des I(I+1)-Gesetzes.

	P_3 -2	$P_3 = 0$	$P_3 = +3$
2^+	4.7448	4.7440	4.7394
3^+	4.7483	4.7457	4.7426
4^+	4.7489	4.7509	4.7450
5^+	4.7530	4.7505	4.7474
6^+	4.7529	4.7568	4.7504

Tabelle III.12

M. 0^+ - 2^+ - Radiusdifferenzen

In diesem Abschnitt schneiden wir ein Problem an, das ebenfalls noch ungeklärt ist. Bei einigen Os- und W-Isotopen ist der Radius des ersten 2^+-Niveaus kleiner als beim Grundzustand [40] : $\Delta \langle R^2 \rangle < 0$.
Wegen der Zentrifugal-Streckung erwartet man aber einen größeren Radius, wie es bei praktisch allen anderen Kernen auch der Fall ist.

In Figur III.43 ist der Schnitt durch eine kollektive Potentialfläche mit zwei Minima zu sehen. Der Grundzustand ist deformiert, gehört also zum höher liegenden Minimum. Das läßt sich auf Grund der verschiedenen Nullpunktsenergien in beiden Töpfen durchaus plausibel machen, aber darauf kommt es hier gar nicht an. Mit Hilfe des Massenparameters der kinetischen Energie kann man die Höhe des 0^+-Grundzustandes im 2.Minimum verschieben. In der Figur sind mehrere solche Fälle eingezeichnet. Hebt man den Grundzustand bis über die Schwelle, so wird er sphärisch. In vergrößertem Maßstab sind als Beispiel auch die ersten angeregten Niveaus, die zum Grundzustand bei 1.71 MeV gehören, angegeben.

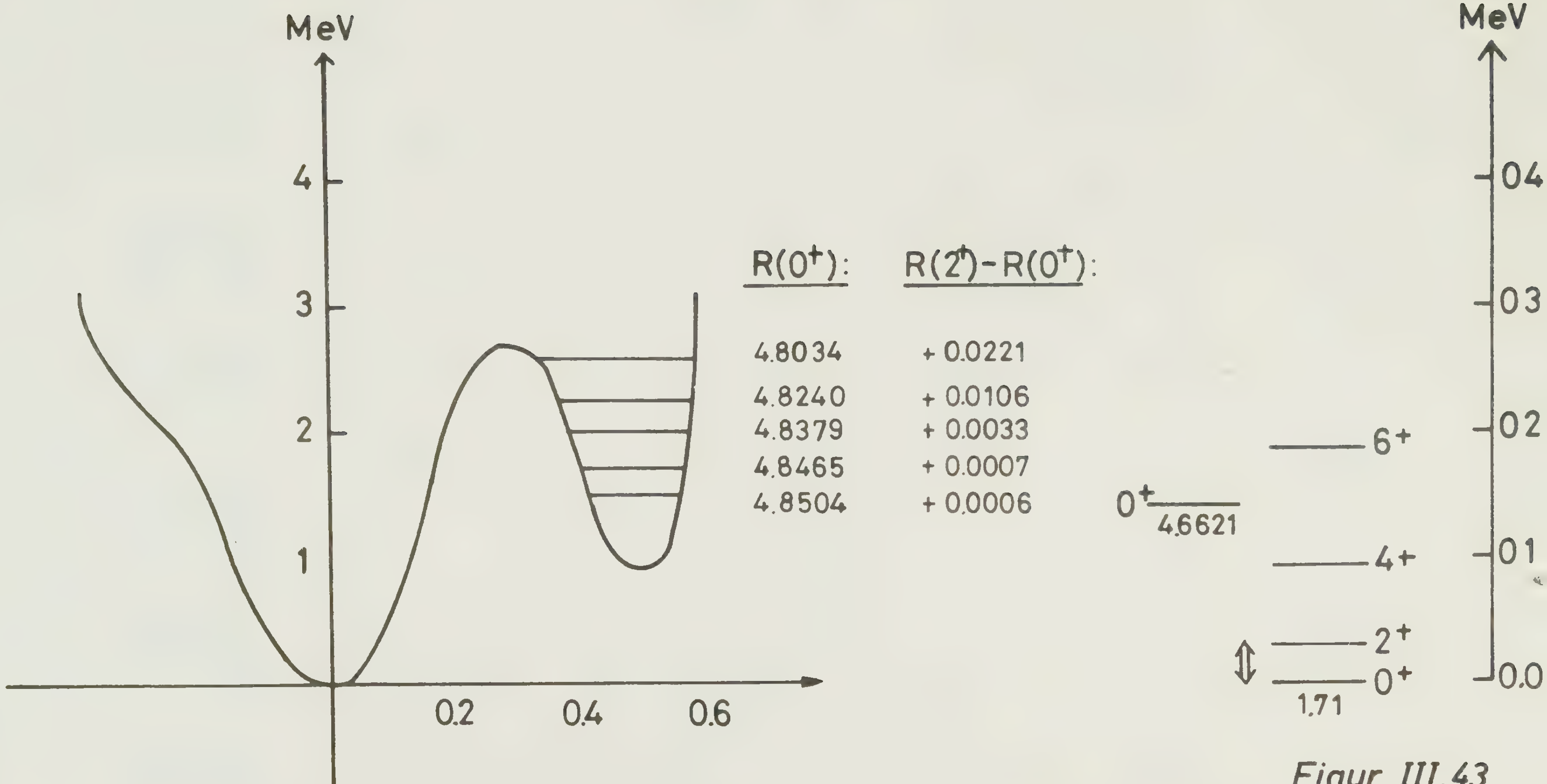
Das 2.Minimum steigt in Richtung größerer Deformationen viel steiler an als in Richtung Ursprung, und mit dieser Studie wollten wir die Auswirkungen dieser Flächeneigenschaft auf die Kernradien untersuchen. Der Gedanke ist: Bei höherer Energie müßte wegen der verschiedenen Anstiege der Fläche die Wellenfunktion im Mittel etwas weiter links gelegen sein. Bei höheren Energien ist außerdem die Barriere zum sphärischen Minimum nicht mehr so breit, so daß ein größerer Anteil der Wellenfunktion bis zum sphärischen Minimum hinüberreicht. Das alles sollte dazu führen, daß der mittlere quadratische Radius für höhere Energien abnimmt. In der Figur III.43 erkennt man, daß dies für die 0^+-Grundzustände auch zutrifft, aber die Differenzen $R(2^+) - R(0^+)$ bleiben, entgegen unserer Hoffnung, positiv, werden sogar immer größer. Offensichtlich konkurrieren hier mehrere Effekte:

1. die erwartete Verkleinerung der Radien durch die Flächenkrümmungen
2. die Zentrifugal-Streckung bei den 2^+-Niveaus, die umso stärker wird, je höher der Grundzustand liegt, d.h. je weicher der Kern ist.

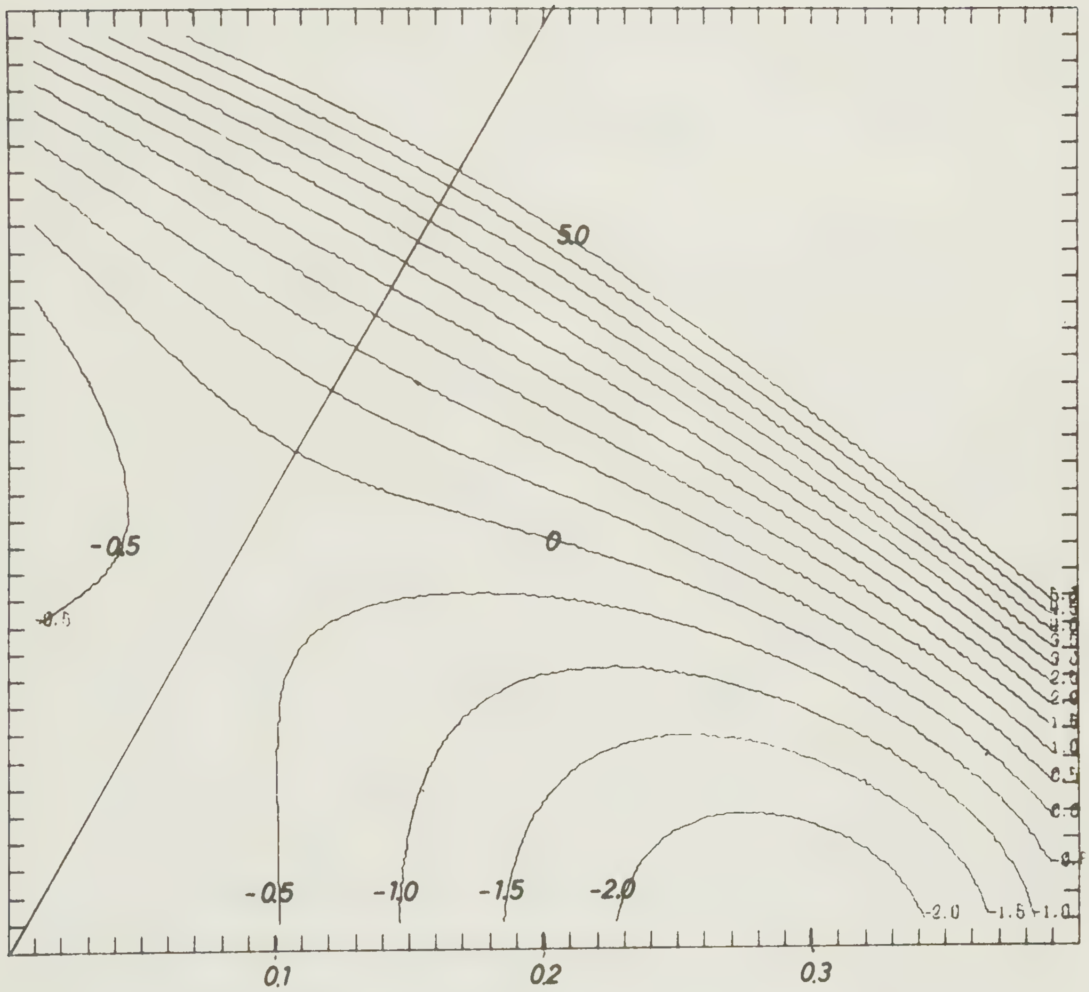
Zum gleichen Resultat wie bei der Figur III.43 sind wir auch mit einer Fläche gelangt, deren einziges (prolates) Minimum zum Ursprung hin sehr flach, nach allen anderen Richtungen aber steil ansteigt (siehe Figur III.44).

Anharmonizitäten der kinetischen Energie können $\Delta \langle R^2 \rangle$ zwar ebenfalls verringern, aber dominiert hat bisher in allen gerechneten Fällen der Effekt der Streckung.

Sowohl die tiefliegenden γ-Banden in den experimentellen Spektren der Os-Isotope als auch die mikroskopischen Rechnungen von Mosel weisen diese Kerne als asymmetrische Kreisel aus. Wir werden deshalb zu prüfen haben, ob es im Asymmetrischen, vielleicht bei $\gamma = 30^{\circ}$, Kerngestalten gibt, für die die Zentrifugalstreckung, wenn schon nicht verschwindet, so doch minimal wird, so daß für diese Gestalten andere Effekte (wie die Krümmungen der Fläche oder Anharmonizitäten der kinetischen Energie) die Chance haben, die Streckung zu überspielen.


MeV
4
3
2
1
0.2
0.4
0.6
R(0⁺):
R(2⁺)-R(0⁺):
4.8034 + 0.0221
4.8240 + 0.0106
4.8379 + 0.0033
4.8465 + 0.0007
4.8504 + 0.0006
0⁺ 4.6621
6⁺
4+
2⁺
0⁺
1.71
MeV
04
03
02
01
0.0

Figur III.43



B_2	$E(0_1^+)$	$R(0_1^+)$	$E(2_1^+)$	$\Delta\langle R^2\rangle$	$E(0_2^+)$	$R(0_2^+)$
120	-0.88	4.7072	-0.80	0.0031	-0.18	4.6965
90	-0.69	4.7044	-0.55	0.0049	-0.10	4.6971
60	-0.37	4.7006	-0.13	0.0079	-0.62	4.7011

Figur III.44

N. Pläne

Das Programm für die nächsten Jahre: Wir möchten die kollektiven Potentialflächen aller gg-Kerne ausfindig machen, um das Wesentliche der kollektiven Struktur jedes Kerns in einem einzigen Bilde verständlich auszudrücken.

Ähnliches streben Kumar und Baranger an [41] , neuerdings auch Bès und Dussel [42] sowie Sørensen [43] . Die mit Kumar und Baranger gemeinsamen Auffassungen und die Unterschiede in den Methoden sind in einer Veröffentlichung zusammengefaßt [44] .

Gegenwärtig wird durch Mosel und Grumann der mikroskopische (statische) Unterbau für unser Kollektivmodell fertiggestellt.

Was den dynamischen Aspekt betrifft, so haben wir uns mit dieser Arbeit durch Diagonalisierung zahlreicher typischer kollektiver Potentialflächen und durch verschiedene weitergehende schematische Studien einen Überblick über die Fähigkeiten des Modells verschafft. Wir wissen jetzt, wo wir das Modell zu erweitern haben, wo unsere Kenntnisse vertieft werden müssen; es ist ein Stadium erreicht, in dem wir planvoll spezielle Kerne in Angriff nehmen können.

Unsere weiteren Absichten seien in Stichworten notiert:

1) Bevorzugtes Studium von kollektiven Potentialflächen mit mehreren Minima im Hinblick auf die Deutung merkwürdiger experimenteller Spektren wie etwa in Cd oder Zr [45] .
2) Ergänzung des Modells durch höhere Terme des Potentials, aber besonders der kinetischen Energie.
3) Berechnung der Zustände mit größerem Drehimpuls als 6^+.
4) Kopplung mit anderen kollektiven Freiheitsgraden wie Oktupol- und Hexadekupol-Deformationen.
5) Auf längere Sicht: Erweiterung auf ug-Kerne durch Ankopplung einzelner Nukleonen.
6) Bestimmung der Quadrupolmomente und Übergangswahrscheinlichkeiten in höherer als 2.Ordnung.

Meinem Lehrer, Herrn Prof.Dr.Greiner, möchte ich für sein Interesse und für seine Unterstützung danken. Seine physikalischen Vorstellungen gaben nicht nur den Anstoß zu dieser Arbeit, sondern haben auch ihren Verlauf entscheidend beeinflußt.

Herr Dr.Weber hat die Brauchbarkeit der Hecht-Arbeit für die mathematische Behandlung der kollektiven Kern-Dynamik erkannt, die gruppentheoretische Methode in unserem Institut heimisch gemacht und zusammen mit Herrn Dr.Arenhövel begonnen, Programme für die reduzierten Matrixelemente zu erstellen. Beiden sei herzlich gedankt.

Besonders gern denke ich an die langen Diskussionen, die ich mit Herrn Dr.Mosel führte, um einige Resultate meiner Rechnungen in der rechten Weise zu interpretieren.

Frau Utschig und Fräulein Eidt sei vielmals für die Anfertigung der zahlreichen Figuren gedankt.

Das Deutsche Rechenzentrum Darmstadt, die Kernforschungsanlage Jülich und das Zentrale Recheninstitut der Universität Frankfurt stellten die Computer-Zeit für die numerischen Rechnungen zur Verfügung.

Literaturverzeichnis

1. Mosel,U.: Dissertation, Universität Frankfurt/M. (1968)
Mosel,U., Greiner,W.: Z.Physik 217,256 (1968)

2. Grumann,J.: Dissertation Universität Frankfurt/M.

3. Streitwolf,H.-W.: Gruppentheorie in der Festkörperphysik, Akadem.Verlagsges.Geest & Portig KG, Leipzig (1967)

4. McVoy,K.W.: Rev.Mod.Phys.37,no 1, 84 (1965)

5. Racah,G.: Group Theory and Spectroscopy, CERN Reprint 61-8 (1961)

6. Roman,P.: Advanced Quantum Theory, Addison-Wesley Publishing Company, Inc.(1965)

7. Flach,G.und Reif,R.: Gruppentheoretische Methoden im Schalenmodell der Kerne I, Akademie-Verlag Berlin (1964)

8. Hamermesh,M.: Group Theory and Its Applications to Physical Problems, Addison-Wesley Publishing Company, Inc.(1962)

9. Gruber,B.: Preprint (1969)

10. Baker Jr.,G.A.: Phys.Rev.103[2],no 4, 1119 (1956)

11. Weyl,H.: The Theory of Groups and Quantum Mechanics, Dover Publications, New York (1932)

12. Hecht,K.T.: Nucl.Phys.63,177 (1965)

13. Rakavy, G.: Nucl.Phys.4,289 (1957)

14. Le Tourneux,J.: Mat.Fys.Medd.Dan.Selsk.34, no 11 (1965)

15. Weber,H.J., Huber,M.G., Greiner,W.: Z.Physik 190,25 (1966)

16. Racah,G.: Phys.Rev.76,1352 (1949)

17. Lagally,M., Franz,W.: Vorlesungen über Vektorrechnung Akadem.Verlagsges.Geest & Portig KG, Leipzig (1959)

18. Fano,U., Racah,G.: Irreducible Tensorial Sets, Academic Press Inc., Publishers, New York (1959)

19. Urbas,T.D.: Diplomarbeit, Universität Frankfurt/M. (1966)

20. Weber,H.J., Huber,M.G., Greiner,W.: Z.Physik 192,182 (1966)

21. Hecht,K.T.: Proc.NUFFIC Int.Summer Course in Science at Nijenrode Castle, The Netherlands (1959)

22. Gneuß,G.: Diplomarbeit, Universität Frankfurt/M. (1967)

23. Bohr,A.: Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.26,No.14 (1952)

24. Bohr,A.,Mottelson,B.R.: Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.27,No.16 (1953)

25. Davydow,A.S.,Fillipov,G.F.: Nucl.Phys.8,237 (1958)

26. Faessler,A.,Greiner,W.: Z.Physik 168,425 (1962)

27. Faessler,A.,Greiner,W.,Sheline,R.: Nucl.Phys.70,33 (1965)

28. Noack,C.C.: Nucl.Phys.A108,493 (1968)

29. Albrecht,K.: Dissertation, Universität Frankfurt/M. (1970)

30. Scharnweber,D.: Dissertation, Universität Frankfurt/M. (1970)

31. Bliemeister, J. : Diplomarbeit, Universität Frankfurt/M. (1970)

32. Kishimoto,T.,Ikeda,K.: Progress of Theoret.Physics 40,No.3, 499 (1968)

33. Gneuß,G.,Mosel,U.,Greiner,W.: Phys.Lett.31B, 269 (1970)

34. Sheline,R.K.: Rev.Mod.Phys.32,1 (1960)

35. Sakai,M.: Nucl.Phys.A104,301 (1968)

36. Gneuß,G.,Greiner,W.,Mosel,U.: wird in Phys.Lett.veröffentlicht

37. Emery,G.T.,Kane,W.R.,McKeown,M.,Pearlman,M.L.,Scharff-Goldhaber,G.: Phys.Rev.129,2597 (1963)

38. Rakovitskii,S.L.: Soviet Journal of Nucl.Phys.9,no 2,197 (1969)

39. Lindner,A.: Nucl.Phys.82,593 (1966)

40. Grodzins,L.: Nucl.Structure,Dubna Symposium (1968)

41. Kumar,K.,Baranger,M.: Nucl.Phys.A92,608 (1967)
Kumar,K.: Nucl.Phys.A92,653 (1967)
Baranger,M.,Kumar,K.: Nucl.Phys.A122,241 (1968)
Kumar,K.,Baranger,M.: Nucl.Phys.A122,273 (1968)

42. Bès,D.R.,Dussel,G.G.: Nucl.Phys.A135,1 (1969)
Bès,D.R.,Dussel,G.G.: Nucl.Phys.A135,25 (1969)
Dussel,G.G.,Bès,D.R.: Nucl.Phys.A143,623 (1970)

43. Sørensen,B.: Nucl.Phys.A142,392 (1970)
Sørensen,B.: Nucl.Phys.A142,411 (1970)

44. Gneuß,G.,Mosel,U.,Greiner,W.: Phys.Lett.30B,397 (1969)

45. von Bernus,L.: Diplomarbeit, Universität Frankfurt/M. (1970)

Lebenslauf

Am 13.Dezember 1940 wurde ich in Großharthau (Sachsen) geboren. Meine Eltern sind der kaufmännische Angestellte Georg Gneuß und seine Ehefrau Käthe geborene Gottlöber.

Vom Herbst 1947 bis Weihnachten 1954 besuchte ich die Grundschule meines Geburtsortes. Anfang 1955 zogen wir nach Hanau/Main um. Ich wurde in eine Untertertia des Aufbaugymnasiums in Friedberg/Hessen aufgenommen. Nach zwei Jahren, zu Ostern 1957, wechselte ich zur Hohen Landesschule in Hanau über, an der ich zu Ostern 1961 die Reifeprüfung ablegte.

Anschließend war ich ein Jahr lang Soldat der Bundeswehr. Nach der Entlassung im Frühjahr 1962 begann ich das Studium der Physik an der Johann Wolfgang Goethe-Universität zu Frankfurt/M.

Im November 1964 bestand ich die Diplom-Vorprüfung, im Februar 1967 die Diplom-Prüfung für Physiker. Die Diplom-Arbeit und die Dissertation entstanden im Institut für Theoretische Physik unter Leitung von Professor Dr.W.Greiner.